



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

TESIS DE DOCTOR EN INGENIERIA QUIMICA

**Control Estadístico Multivariado de Procesos:
Nuevas Estrategias para Identificación de Fallas**

Marco Vinicio Cedeño Viteri

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

2015



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

TESIS DE DOCTOR EN INGENIERIA QUIMICA

**Control Estadístico Multivariado de Procesos:
Nuevas Estrategias para Identificación de Fallas**

Marco Vinicio Cedeño Viteri

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

2015

PREFACIO

Esta Tesis se presenta como parte de los requisitos para optar al grado Académico de Doctor en Ingeniería Química, de la Universidad Nacional del Sur y no ha sido presentada previamente para la obtención de otro título en esta Universidad u otras. La misma contiene los resultados obtenidos en investigaciones llevadas a cabo en la Planta Piloto de Ingeniería Química, dependiente del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Sur y del CONICET, durante el período comprendido entre el 13 de setiembre de 2011 y el 29 de octubre de 2015, bajo la dirección de la Dra. Mabel Cristina Sánchez, profesora del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Sur.

Marco Vinicio Cedeño Viteri



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR
Secretaría General de Posgrado y Educación Continua

La presente tesis ha sido aprobada el / / , mereciendo
la calificación de(.....)

Solamente Dios hace todas las cosas posibles

Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (CONICET) por haber proporcionado el soporte económico, a las autoridades de la Universidad Nacional del Sur y de la Planta Piloto de Ingeniería Química (Plapiqui) por recibirme en sus instalaciones y haberme permitido desarrollar los cursos de posgrado y esta Tesis doctoral.

A mi directora, Mabel Sánchez, que desde el primer momento se dedicó de lleno a mi formación profesional y personal mediante correcciones y consejos laborales y personales, los cuales son valorados y puestos en práctica día a día. Los compañeros de oficina (Rodrigo, Rubén, Leandro, Jhovany y Claudia) que a través de los años hemos compartido muchos momentos pero especialmente debates en general que enriquecieron mi opinión sobre el mundo, la vida y la sociedad.

De la misma manera me gustaría recordar a los amigos que fui haciendo por la vida (universidad, deportes, pensiones e iglesia) ya que cada uno de ellos ha sido parte de mi paso por este pedazo de tierra a la que hoy también llamo mi país del cual ellos me contagiaron ese amor y esa argentinidad.

El apoyo incansable y sin condiciones que me han brindado mis padres (Dionisio y Myriam) y mis hermanos (Darío, Erick, Bryan, Melissa y William), por darme la oportunidad de realizar mi formación en este país lejos de ellos, así como el esfuerzo hecho para juntarnos todos en las fiestas y la alegría con la que disfrutamos de Manta.

Además a mis suegros (José y Anita), los cuales me acogieron como hijo propio y lo hicieron sentir profundamente en el vivir diario en la peluquería o su casa con distintos tipos de ayudas.

Y por último pero más importante, la inspiración de mi vida (Romina). Gracias por las noches de desvelo, los momentos de alegrías y de penas que aprendimos a vivir juntos, pero más importante que nada, gracias por el amor tan grande que me brindas día a día y que por el cual yo también pude aprender el significado del amor, además del regalo más grande que me pudiste dar (Jean Marco) y que vamos a seguir regalándonos (. . . .). Te Amo

Resumen

El control estadístico multivariado de procesos comprende estrategias destinadas a monitorear y controlar un proceso industrial. Las mismas emplean métodos estadísticos con el fin de extraer información cuantitativa del sistema a partir de datos históricos, y modelar su comportamiento normal. Durante la operación del proceso, se analiza si éste se encuentra en control estadístico mediante el empleo de test de hipótesis. Si se detectan desviaciones respecto de la condición operativa normal, la identificación del conjunto de observaciones mediante las cuales se manifiesta la situación anómala ayuda a diagnosticar la causa del problema, y a tomar decisiones conducentes a su resolución.

Esta tesis comprende el desarrollo e implementación de nuevas estrategias destinadas a aislar las observaciones que revelan un problema operativo, tanto para procesos continuos como para los discontinuos.

Para tal fin, se define el concepto del Vecino en Control más Cercano (Nearest in Control Neighbor, NICN) a la observación, como aquel que minimiza una cierta medida de distancia a la misma, y se ubica en el contorno de la región de control estadístico del proceso. Se evalúan las contribuciones de las variables al estadístico en función de la distancia entre el NICN y la observación, y se determina el conjunto de variables que revelan el comportamiento anormal de dos maneras diferentes. Una de ellas consiste en estimar la función de densidad de probabilidad empírica de la contribución de la variable al estadístico cuando ésta no revela la situación anormal. La otra aplica una técnica de agrupamiento jerárquico y se desarrolla especialmente para el monitoreo de procesos discontinuos. Las nuevas técnicas de aislamiento de variables evitan todas las suposiciones inherentes a los métodos existentes.

Se presenta un exhaustivo análisis del desempeño de los procedimientos desarrollados en esta tesis para un ejemplo de aplicación complejo, que comprende un bioreactor para la producción de penicilina. Este opera en modo discontinuo en la primera fase del proceso y de manera semicontinua en la segunda.

Se utiliza un conjunto de índices de desempeño con el fin de comparar el comportamiento de las técnica propuesta con el obtenido empleando otras metodologías presentadas recientemente en la literatura. Con fines de comparación, se selecciona un procedimiento que utiliza directamente los valores de las observaciones (OSS - Original Space Strategy), y otro que emplea sus proyecciones en un espacio de variables latentes (Análisis de Componentes Principales Kernel).

El estudio de desempeño muestra que la metodología propuesta permite un aislamiento perfecto de las variables mediante las cuales se manifiesta la situación anormal en una amplia mayoría de los casos simulados.

Los lineamientos generales de la técnica propuesta pueden extenderse con facilidad para abordar el monitoreo empleando otros estadísticos y otros espacios de variables.

Abstract

Multivariate statistical process control involves a group of strategies devoted to monitor and control an industrial process. Those use statistical methods to extract quantitative information of the system using historical data, and model its normal behavior. During the process operation, a statistical hypothesis test is used to analyze if the process is under statistical control. If deviations with respect to the normal operating conditions are detected, the identification of the observations which reveal the abnormal situation helps to diagnose the cause of the failure, and to take proper decisions to solve it.

This thesis presents the development and implementation of new strategies used to isolate the observations that reveal the fault cause for continuous and batch processes.

With this purpose, the Nearest in Control Neighbor (NICN) to the observation point is defined as the one which minimizes a certain distance measure with respect to the measurement vector, and it is located on the statistical control region contour. Variable contributions to the statistic are evaluated in terms of the distance between the NICN and the observation, and the subset of variables which reveal the fault are determined using two different methods. One of them estimates the empirical probability density function of the variable contribution to the statistic when it does not reveal the fault. The other one applies a hierarchical clustering technique, and it is especially developed for batch process monitoring. The new variable isolation techniques avoid the use of the assumptions of the existing methods.

An extensive performance analysis of the procedures developed in this thesis is presented. The application example comprises a bioreactor for the production of penicillin.

During the first process phase, it operates in batch mode and it turns to a semibatch operation next.

A set of performance indexes are used to compare the behavior of the proposed technique with respect to that provided by other methodologies recently presented in the literature. For comparative purposes, two procedures are selected. One of them uses the observations without transforming them (OSS - Original Space Strategy). The other one employs their projections on a latent variable space (Kernel Principal Component Analysis).

Performance studies show that the new methodology allows a perfect isolation of the set of variables which reveal the faults for the majority of the simulated cases.

The conceptual framework of the proposed technique can be easily extended to deal with methods that use other statistics and variable spaces.

Índice General

1. *Introducción*

1.1	Motivación	3
1.2	Revisión Bibliográfica – Estado del Arte	6
1.2.1	Modelado y Detección.....	7
1.2.2	Identificación	19
1.3	Objetivos	24
1.3	Organización de la Tesis	24
1.4	Referencias	26

2. *Técnicas Básicas de Monitoreo Estadístico de Procesos*

2.1	Introducción	33
2.2	Monitoreo en el Espacio de las Variables Originales	34
2.2.1	Método de Mason, Young y Tracy.....	37
2.2.2	Estrategia en el Espacio Original.....	39
2.2.3	Implementación de la Estrategia de Monitoreo OSS.....	42
2.2.3.1	Etapa I	42
2.2.3.2	Etapa II.....	43
2.3	Monitoreo en el Espacio de las Variables Latentes	43
2.3.1	Análisis de Componentes Principales.....	44
2.3.2	Implementación de la Estrategia de Monitoreo PCA.....	55
2.3.2.1	Etapa I	55
2.3.2.2	Etapa II.....	56
2.3.3	Análisis de Componentes Principales Kernel.....	57
2.3.4	Implementación de la Estrategia de Monitoreo KPCA.....	65
2.3.4.1	Etapa I	65
2.3.4.2	Etapa II.....	65
2.4	Conclusiones	66

2.5	Referencias	68
------------	--------------------	-----------

3. Estrategia de Identificación basada en el Vecino en Control más Cercano: Procesos continuos

3.1	Introducción	73
3.2	Nueva estrategia para estimar contribuciones de las variables al estadístico T^2	73
3.3	Implementación de la Estrategia de Monitoreo	80
3.3.1	Etapa I	80
3.3.2	Etapa II	81
3.4	Casos de Estudio	81
3.3.1	Caso de Estudio I	82
3.3.2	Caso de Estudio II	89
3.5	Conclusiones	94
3.6	Referencias	96

4. Estrategia de Identificación basada en el Vecino en Control más Cercano: Procesos batch

4.1	Introducción	99
4.2	Nueva estrategia de monitoreo de procesos batch en el espacio de las variables originales	100
4.3	Implementación de la Estrategia de Monitoreo	111
4.3.1	Etapa I	111
4.3.2	Etapa II	111
4.4	Caso de Estudio	112
4.5	Resultados y Discusiones	115
4.6	Conclusiones	117
4.7	Referencias	119

5. Descripción del Caso de Estudio

5.1	Introducción	123
5.2	Modelo Matemático del Proceso de Producción de Penicilina	125
5.2.1	Crecimiento de Biomasa.....	127
5.2.2	Efecto y control del pH sobre el crecimiento de biomasa.....	128
5.2.3	Efecto y control de la Temperatura sobre el crecimiento de biomasa.....	130
5.2.4	Producción de Penicilina.....	132
5.2.5	Modelo de Sustrato.....	132
5.2.6	Cambios del Volumen del Cultivo.....	133
5.2.7	Calor de Reacción.....	134
5.2.8	Evolución de CO ₂	135
5.2.9	Generación de la Población de Referencia.....	135
5.3	Referencias	140

6. Resultados y Discusión

6.1	Generación de Datos	144
6.1.1	Variaciones en las condiciones Iniciales.....	145
6.1.2	Cambios en la Potencia del Agitador	145
6.1.3	Cambios en la Velocidad de Aireación	146
6.1.4	Cambios en el caudal de entrada del sustrato	147
6.2	Base de Comparación entre distintas técnicas	148
6.3	Comparación entre OSSBP, NICNBP, KPCA-RBC Y KPCA-CN	151
6.4	Conclusiones	169
6.5	Referencias	171

7. Conclusiones y Trabajos Futuros

7.1	Conclusiones	174
7.2	Trabajos Futuros	177

Apéndice 1

A1.1	Test de Hipótesis	180
A1.2	Errores Tipo I y Tipo II	181

Apéndice 2

A2.1	Estimación de Funciones de Densidad de Probabilidad. Método del kernel (KDE)	183
A2.2	Referencias	188

Apéndice 3

A3.1	Límite de control para estadísticos de forma cuadrática	189
A3.1.1	Estadísticos en el espacio de las variables latentes.....	190
A3.1.1.1	Estadístico D^2	190
A3.1.1.2	Estadístico SPE	191
A3.1.1.3	Estadístico γ	192
A3.1.2	Estadísticos en el espacio latente de las características.....	193
A3.1.2.1	Estadístico D^2	194
A3.1.2.2	Estadístico SPE	194
A3.1.2.3	Estadístico γ	195
A3.2	Límite de control para las RBC	196
A3.1	Referencias	199

Índice de Tablas

Tabla 2.1: Parámetros de la distribución de probabilidad de D^2 , SPE y γ (PCA).....	53
Tabla 2.2: Matrices que definen la forma cuadrática de D^2 , SPE y γ	54
Tabla 2.3: Parámetros para estimar los límites de control de las RBC.....	55
Tabla 2.4: Parámetros de la distribución de probabilidad de D^2 , SPE y γ (KPCA).....	62
Tabla 3.1: Ejemplo numérico (De Maesschalck y col., 2000).....	83
Tabla 3.2: Observaciones para el Caso de Estudio I.....	83
Tabla 3.3: CVs – Método NICN - Caso de Estudio I.....	85
Tabla 3.4: CVs – Método OSS - Caso de Estudio I ($\kappa=3$).....	85
Tabla 3.5: Estadísticos D^2 , SPE y γ PCA - Caso de Estudio I.....	86
Tabla 3.6: CVs al D^2 ($\kappa=2$) - Caso de Estudio I.....	87
Tabla 3.7: CVs al SPE ($\kappa=2$) - Caso de Estudio I.....	87
Tabla 3.8: CVs al γ Caso de Estudio I.....	88
Tabla 3.9: Ejemplo del Reactor Tubular.....	90
Tabla 3.10: Observaciones estandarizadas y T^2 para el Caso de Estudio II.....	90
Tabla 3.11: CVs – Método NICN - Caso de Estudio II.....	91
Tabla 3.12: CVs – Método OSS - Caso de Estudio II ($\kappa=3$).....	92
Tabla 3.13: Contribuciones a los estadísticos D^2 y SPE para el Caso de Estudio II ($\kappa= 3$).....	93
Tabla 3.14: Contribuciones al estadístico γ para el Caso de Estudio II.....	94
Tabla 4.1: Parámetros y constantes del ejemplo de aplicación batch.....	113
Tabla 4.2: Conjunto de fallas simuladas.....	114
Tabla 4.3: Receta del batch.....	115
Tabla 4.4: Índices de desempeño para identificación.....	116
Tabla 5.1: Condiciones iniciales, parámetros cinéticos y de los controladores.....	125
Tabla 5.2: Descripción de las observaciones del sistema semi-batch.....	136
Tabla 6.1: Clasificación de fallas de Condición Inicial.....	145
Tabla 6.2: Cambios en la Potencia del Agitador.....	146
Tabla 6.3: Cambios en la velocidad de Aireación.....	147
Tabla 6.4: Cambios en el caudal de entrada del substrato.....	147

Tabla 6.5: Conjunto General de Fallas simuladas.....	148
Tabla 6.6: AVTI y α_L para todas las estrategias.....	151
Tabla 6.7: Índices de detección de las estrategias analizadas.....	168
Tabla 6.8: Resultados de identificación de las variables sospechosas.....	168
Tabla A2.1: Distribuciones usadas como <i>kernel</i> en KDE.....	184
Tabla A2.1: Algoritmo de cálculo de $\hat{f}(x)$ usando KDE.....	187
Tabla A3.1: Parámetros de la distribución de probabilidad de D^2 , SPE y γ	193
Tabla A3.2: Parámetros de la distribución de probabilidad del $D2$, SPE y γ (KPCA).....	196

Índice de Figuras

Figura 2.1: Límites para y considerando sus distribuciones condicionales.....	37
Figura 2.2 Contribución de la j -ésima variable al estadístico T^2	41
Figura 3.1: Diferentes posiciones del NICN dependiendo de la distancia seleccionada.....	78
Figura 4.1: Estructura de datos en la matriz \underline{Z}	101
Figura 4.2: Esquema de desdoblamiento horizontal de la matriz de datos tridimensional \underline{X}	103
Figura 4.3: Esquema de desdoblamiento vertical de la matriz de datos tridimensional \underline{X}	103
Figura 4.4: Etapa de modelado fuera de línea.....	106
Figura 4.5: Ejemplo de agrupamientos aglomerativos (clusters).....	109
Figura 4.6: Dendrograma.....	110
Figura 4.7: Diagrama de flujo del ejemplo de aplicación batch.....	114
Figura 5.1: Estructura Entrada-Salida del modelo de fermentación.....	125
Figura 5.2: Controlador PID del agua fría y su respuesta en operación a lazo cerrado	131
Figura 5.3. Diagrama de flujo del proceso de producción de penicilina.....	136
Figura 5.4: Trayectoria nominal de las Variables 1 a la 4.....	137
Figura 5.5: Trayectoria nominal de las Variables 5 a la 8.....	137
Figura 5.6: Trayectoria nominal de las Variables 9 a la 12.....	138
Figura 5.7: Trayectoria nominal de la Variable 13.....	138
Figura 6.1: Carta de control del T^2 , Falla 11.....	154
Figura 6.2: Carta de control del γ (KPCA-RBC), Falla 11.....	154
Figura 6.3: Carta de control del γ (KPCA-CN).....	155
Figura 6.4: Contribuciones de la estrategia NICNBP, Falla 11.....	156
Figura 6.5: Contribuciones de la estrategia OSSBP, Falla 11.....	156
Figura 6.6: Contribuciones de la estrategia KPCA-RBC, Falla 11.....	157
Figura 6.7: Contribuciones de la estrategia KPCA-CN, Falla 11.....	157
Figura 6.8: Carta de control del T^2 , Falla 120.....	158
Figura 6.9: Carta de control del γ (KPCA-RBC), Falla 120.....	159
Figura 6.10: Carta de control del γ (KPCA-CN), Falla 120.....	159
Figura 6.11: Contribuciones de la estrategia NICNBP, Falla 120.....	160

Figura 6.12: Contribuciones de la estrategia OSSBP, Falla 120.....	161
Figura 6.13: Contribuciones de la estrategia KPCA-RBC, Falla 120.....	161
Figura 6.14: Contribuciones de la estrategia KPCA-CN, Falla 120.....	162
Figura 6.15: Carta de control del T^2 , Falla 237.....	163
Figura 6.16: Carta de control del estadístico γ (KPCA-RBC), Falla 237.....	163
Figura 6.17: Carta de control del γ (KPCA-CN), Falla 237.....	164
Figura 6.18: Contribuciones de la estrategia NICNBP, Falla 237.....	165
Figura 6.19: Contribuciones de la estrategia NICNBP, Falla 237.....	165
Figura 6.20: Contribuciones de la estrategia KPCA-RBC, Falla 237.....	166
Figura 6.21: Contribuciones de la estrategia KPCA-CN, Falla 237.....	166
Figura A1.1: Interpretación gráfica de un test de hipótesis.....	182
Figura A2.1: Estimación de $f(x)$ basada en un conjunto de datos $\mathbf{x} \approx \mathcal{N}(0;1)$	185
Figura A2.2: Estimaciones de $f(x)$ usando distintos valores de h	186

Capítulo 1

1	<i>Introducción</i>	3
1.1	Motivación	3
1.2	Revisión Bibliográfica – Estado del Arte	6
1.2.1	Modelado y Detección	7
1.2.2	Identificación	19
1.3	Objetivos	24
1.4	Organización de la Tesis	24
1.5	Referencias	26

Página en Blanco

1 Introducción

1.1 Motivación

El Control Estadístico de Procesos (SPC) comprende estrategias destinadas a monitorear y controlar un proceso productivo. Las mismas emplean métodos estadísticos con el fin de extraer información cuantitativa del sistema a partir de datos históricos (Venkatasubramanian y col., 2003). Se considera que el proceso no se encuentra en control estadístico si se detectan desviaciones respecto de una condición normal o habitual, originadas por causas especiales. La identificación del conjunto de variables mediante las cuales se manifiesta la situación anómala ayuda a diagnosticar la causa del problema, y a tomar decisiones conducentes a su resolución.

Durante las últimas décadas se extendió el uso de metodologías de SPC en la industria, principalmente por dos motivos. Por una parte, la instalación de sistemas de control distribuido permitió recolectar y almacenar grandes conjuntos de observaciones de las variables de proceso, las cuales contienen la información necesaria para las tareas de modelado, monitoreo y control. Por la otra, se hicieron avances significativos en las bases teóricas e implementaciones de la minería de datos y del procesamiento de mediciones, los que permitieron el desarrollo de nuevas metodologías de SPC.

El atractivo de dichas estrategias para diagnóstico de falla es su capacidad de comparar los diferentes estados operativos del proceso con aquellos que produjeron un producto final conforme a las características requeridas para el mismo. Esto resulta esencial en la industria moderna, ya que está sujeta a una gran cantidad de requisitos medioambientales, disposiciones legales y requerimientos de calidad, impuestos por la competitividad de los mercados, que generan la necesidad de acotar tanto como sea posible el rango de variabilidad

e incertidumbre al que están sujetos los procesos de producción. Si bien en los últimos años la automatización y la alta especificidad de la industria moderna han producido sistemas en los cuales las variaciones en los procedimientos de producción durante la fabricación de un determinado producto son cada vez menos significativas, existen muchas fuentes de variabilidad asociadas de forma indirecta a dichos procedimientos.

Dado que el objetivo principal del monitoreo de procesos es la detección e identificación de condiciones de operación anormales con el fin de poder implementar alguna acción de control, el mismo se compone de tres actividades fundamentales: detección del estado anómalo, identificación de la(s) variable(s) que señala(n) dicho estado y finalmente el diagnóstico, donde se indican las causas aparentes del problema. Según Jackson (1991), dichas estrategias deben, como mínimo, ser capaces de:

- a. Responder si el proceso está o no bajo control.
- b. Fijar una cota para el Error global de Tipo I.
- c. Considerar las relaciones existentes entre las variables.
- d. Diagnosticar la causa del problema si el proceso se declara fuera de control.

El cumplimiento de los tres primeros puntos no presenta mayores complicaciones una vez que se elige la estrategia de monitoreo. El usuario define los niveles de confianza y los criterios para la declaración de los estados fuera de control de acuerdo a las necesidades del caso particular y su conocimiento del proceso. Sin embargo, el último de los puntos de esta lista resulta particularmente difícil de satisfacer, especialmente cuando el número de variables consideradas es grande.

El monitoreo del proceso se lleva a cabo en forma continua. A medida que se obtienen las nuevas observaciones del sistema, éstas se transforman y se genera información que permite determinar si el proceso se encuentra o no bajo control. El conjunto de estas actividades componen la etapa de detección, y están directamente relacionadas con los primeros tres puntos mencionados anteriormente. La detección de eventos anormales se efectúa mediante la aplicación de tests de hipótesis estadísticos. Los conceptos fundamentales de esta herramienta estadística se revisan en el Apéndice 1.

Cuando se detecta una situación anormal, el proceso se declara fuera de control y se inicia la etapa de identificación. El objetivo de ésta es encontrar el conjunto de mediciones que revelan el evento anómalo. Una vez que estas variables han sido identificadas comienza el proceso de diagnóstico, cuyo objetivo es encontrar el origen de la desviación observada (que puede ser o no una alteración en alguna de las variables medidas).

Las etapas de identificación y diagnóstico se tratan generalmente en forma conjunta, refiriéndose a ellas como la etapa de diagnóstico del sistema. Sin embargo, la etapa de diagnóstico propiamente dicha tiene características muy particulares dado que requiere frecuentemente el uso adicional de sistemas expertos para encontrar el origen de la anomalía. Estos sistemas se basan generalmente en el empleo de técnicas tales como lógica difusa y redes neuronales.

Si se consideran ahora las actividades relacionadas específicamente con la implementación de una estrategia de monitoreo de procesos, éstas se separan en dos etapas. Las Etapas I y II son también llamadas modelado fuera de línea (Etapa I) y monitoreo en línea (Etapa II) (Nomikos y MacGregor, 1994; NIST/Sematech, 2008).

El objetivo principal de la Etapa I es la obtención de un modelo empírico que represente adecuadamente el proceso. Las tareas involucradas en esta fase son: el pretratamiento de los

datos, la formulación del modelo y el cálculo de los valores críticos de los estadísticos usados para la detección de eventos anormales. En la Etapa II el proceso se monitorea en línea a fin de determinar si éste se encuentra en estado de control. Los modelos estadísticos desarrollados en la etapa anterior se utilizan para la tarea de detección de eventos anormales, y en caso de ser necesario, para la identificación de las variables que revelan el estado fuera de control.

Una primera aproximación al control estadístico en la industria de procesos se realizó mediante el uso de las tradicionales cartas de Shewhart, las cuales monitorean, en forma individual, un conjunto de variables claves relacionadas con la calidad del producto y la seguridad. Estas cartas se empleaban con el objetivo de detectar la posible ocurrencia de algún evento que modificara los valores de dichas variables, permitiendo así realizar acciones correctivas y minimizar su efecto en el proceso. Sin embargo, estas estrategias no resultan adecuadas para la industria moderna, donde se miden cientos de variables altamente correlacionadas. Con el fin de considerar la naturaleza multivariada de los sistemas y comprender su efecto sobre el comportamiento de los mismos, se propusieron diferentes metodologías de Control Estadístico Multivariado de Procesos (MSPC).

La siguiente sección presenta un análisis crítico y conciso del estado del arte respecto del MSPC de procesos continuos y discontinuos, que sirve como fundamento para el desarrollo de nuevas metodologías de monitoreo aplicables a procesos industriales.

1.2 Revisión Bibliográfica – Estado del Arte

A continuación se analizan las contribuciones más significativas reportadas en la literatura en relación con los aspectos de modelado y detección, e identificación de las técnicas de MSPC.

1.2.1 Modelado y Detección

1.2.1.1 Procesos Continuos

Inicialmente las estrategias de MSPC abordaron el seguimiento de la operación de procesos continuos. En 1931 Hotelling introdujo un estadístico, que lleva su nombre, con el fin de aplicarlo a problemas de control estadístico de la calidad que comprenden mediciones correlacionadas. Esto significó un importante avance en relación con el uso de las cartas de control individuales. El Estadístico de Hotelling, T^2 , es una métrica global que permite determinar de manera sencilla la existencia de fallas en procesos con datos correlacionados.

Para el caso de procesos industriales continuos, se asume que se dispone de I vectores observación de J variables cada uno, obtenidos para diferentes instantes de tiempo en condiciones operativas normales. Este conjunto de observaciones se denomina Población de Referencia (PR) y con ellas se forma una matriz $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{I \times J}$, tal que la matriz de covarianza de los datos es $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{J \times J}$. El T^2 para una nueva observación \mathbf{z} se define de la siguiente manera

$$T^2 = (\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})^T \mathbf{S}^{-1} (\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}}), \quad (1.1)$$

donde $\bar{\mathbf{z}}$ es el vector de medias muestrales. Con el fin de determinar si el proceso se encuentra en control estadístico en el nuevo intervalo de muestreo, se compara el valor del T^2 con un límite superior, denominado valor crítico T_c^2 , que se evalúa teniendo en cuenta la función de densidad de probabilidad del T^2 y la probabilidad de cometer Error Tipo I seleccionada, α , de la siguiente forma

$$T_c^2 = \frac{J(I^2 - 1)}{(I^2 - IJ)} \mathcal{F}_{J, I-J, \alpha} \quad (1.2)$$

donde $\mathcal{F}_{J,I-J,\alpha}$ representa el valor de una variable aleatoria que se distribuye según una función \mathcal{F} con J e $(I-J)$ grados de libertad tal que su probabilidad acumulada es $(1-\alpha)$. Cabe notar que pueden surgir problemas de mal condicionamiento de la matriz \mathbf{S} , si las variables del proceso presentan correlaciones lineales o el número de variables de proceso es grande en comparación con la cantidad de observaciones presentes en la PR.

Desde los trabajos pioneros de Jackson (1980), se extendió el uso de técnicas de proyección en estructuras latentes, tales como el Análisis de Componentes Principales (PCA) y la técnica de Cuadrados Mínimos Parciales (PLS). Estas permiten una importante reducción en la dimensionalidad del espacio de descriptores manteniendo la información más significativa sobre el sistema.

Sea \mathbf{X} la matriz de datos estandarizados de la PR. El PCA descompone \mathbf{X} en la suma de Rt productos externos de los vectores \mathbf{t}_r (vector de SCORES) y \mathbf{p}_r (Componente Principal, CP) ($r=1..Rt$), obtenidos mediante una descomposición en autovalores y autovectores de la matriz de correlación muestral, \mathbf{R} , más una parte residual $\mathbf{E}_r \in \mathbb{R}^{I \times J}$:

$$\mathbf{X} = \sum_{r=1}^{Rt} \mathbf{t}_r \otimes \mathbf{p}_r + \mathbf{E} = \mathbf{TP}^T + \mathbf{E}_r \quad (1.3)$$

El modelo empírico del proceso se define en términos de la matriz de SCORES, $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{I \times Rt}$ y de la matriz $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{J \times Rt}$. La primera representa la proyección de los datos de la PR en el espacio reducido de variables, de dimensión Rt , definido por las direcciones contenidas en \mathbf{P} .

Definido el modelo del sistema, éste se utiliza para monitorear una nueva observación, \mathbf{x} , mediante el cálculo de dos métricas (Kourti y MacGregor, 1995): el Estadístico de Hotelling

en el espacio de las variables latentes (VLs), que se denota D^2 , y el Error Cuadrático de Predicción, SPE . El D^2 se calcula de la siguiente manera:

$$D^2 = \mathbf{t}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{t}, \quad (1.4)$$

siendo \mathbf{t} la proyección de la medición en el espacio definido por los Rt CP retenidos y $\mathbf{\Lambda}$ representa la matriz de correlación de \mathbf{T} . El estadístico se distribuye según la siguiente función de densidad de probabilidad

$$D^2 \sim \left(\frac{Rt(I^2 - 1)}{I(I - Rt)} \right) \mathcal{F}_{Rt, I - Rt}, \quad (1.5)$$

El SPE se evalúa en función del error de predicción del modelo, \mathbf{e} , como se expresa a continuación

$$SPE = \|\mathbf{e}\|^2 = \left\| (\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{P}^T) \mathbf{x} \right\|^2 \quad (1.6)$$

y sigue una distribución χ^2 con J grados de libertad. Las distribuciones de probabilidad previamente mencionadas para el D^2 y el SPE se satisfacen si la distribución de probabilidad de \mathbf{x} es normal multivariada. En el Capítulo 2 de esta tesis se explica en detalle la metodología PCA, dado que ha servido como base para el desarrollo de numerosos procedimientos de monitoreo.

Por otra parte, la estrategia PLS considera el caso en el que se dispone de dos matrices de datos diferentes. La primera de ellas, \mathbf{X} , es la matriz de datos de operación descripta previamente. La segunda, \mathbf{Y} , está compuesta por un grupo de variables asociadas a la calidad final del producto. La técnica PCA centra la atención en la obtención de las VLs que expliquen la variabilidad presente en \mathbf{X} . Sin embargo, la posibilidad de usar la información

contenida en \mathbf{X} para predecir las variables de calidad en \mathbf{Y} resulta de gran interés desde el punto de vista del control de procesos (Kourti y MacGregor, 1995). El método PLS es, sin lugar a dudas, una de las metodologías más ampliamente utilizadas con este propósito. Esta se basa en analizar la matriz de covarianza entre \mathbf{X} e \mathbf{Y} . Dado que en esta tesis no se aborda el monitoreo de variables de calidad de manera explícita, no se analiza la estrategia PLS, ni tampoco otras derivadas de ella.

Varios investigadores extendieron la metodología clásica del PCA a fin de considerar otros aspectos en el modelado. En tal sentido, Wangen y Kowalski (1988) introdujeron el concepto de Multiblock PCA que permite analizar diferentes bloques de variables que son medidas en el mismo proceso. De esta manera, las variables medidas en distintos equipos o subsistemas pueden clasificarse como un bloque separado. En la misma línea Westerhuis y col. (1998) propusieron otro algoritmo denominado PCA jerárquico. Por su parte, Qin y col. (2001) desarrollaron los métodos Consensus PCA y Multiblock PLS, en los cuales se consideran las relaciones de las variables en un bloque y las de éstos entre sí, utilizados en el monitoreo de sistemas descentralizados.

Los métodos PCA y PLS tradicionales asumen que el proceso opera en una sola condición de estado estacionario. Sin embargo, en la práctica éstos pueden presentar cambios lentos debido a fluctuaciones de las materias primas, modificaciones de los set-points, degradación del equipamiento, efectos estacionales, etc. Con el objetivo de tomar en consideración las variaciones del proceso por motivos naturales, Wold (1994) implementó una versión adaptiva del PCA combinando filtrado exponencial con PCA o PLS. Por su parte, Li y col. (2000) utilizaron un enfoque alternativo que consiste en actualizar las matrices de correlación que definen los modelos del PCA a medida que se van obteniendo nuevas observaciones. Posteriormente, Wang y col. (2005) desarrollaron un procedimiento que

utiliza una ventana móvil rápida con el fin de evitar el reconocimiento de la falla como una situación normal, lo que podría producirse al aplicar los métodos adaptivos.

Dado que los procesos también pueden operar alrededor de diferentes estados estacionarios nominales, se ha desarrollado un enfoque de monitoreo basado en una biblioteca de modelos, los cuales representan adecuadamente el proceso en un dado rango de condiciones operativas (Hwang y col, 1999; Zhao y col., 2004). Singhai y Seborg (2006) emplearon el factor de similitud con el fin de reconocer si un dado vector de observaciones se corresponde con alguno de los modos operativos del proceso. Además se desarrollaron modelos probabilísticos con el fin de evitar los desajustes que se producen en los períodos de transición entre diferentes estados de operación nominales. Por ejemplo, los métodos basados en el PCA de Máxima Verosimilitud pueden usarse eficientemente para monitorear procesos con modos operativos múltiples (Choi y col., 2005a; Ge y col., 2010a; Ge y col. 2010b).

Por otra parte, algunas variables del proceso pueden mostrar un comportamiento dinámico, es decir, diferentes muestras de una misma variable están autocorrelacionadas. Esta situación puede ser inherente al proceso, al sistema de control, a los ruidos del proceso, etc. Con el fin de monitorear sistemas con estas características, inicialmente se presentó la técnica PCA Dinámico, que consiste en formar un modelo que representa el comportamiento del proceso en el intervalo de muestreo actual y en algunos anteriores (Ku y col. 1995). Si bien esta metodología ha sido ampliamente utilizada, Kruger y col. (2004) demostraron que tiene dificultades para modelar la información dinámica contenida en los datos, y propusieron la incorporación de modelos autoregresivos para mejorar el desempeño del PCA. Con el mismo propósito se han empleado modelos en el espacio de los estados, dado que éstos pueden modelar simultáneamente la autocorrelación y la correlación cruzada entre diferentes variables (Odiowei, 2010).

Las estrategias basadas en el PCA tradicional asumen que los datos del proceso siguen una distribución normal o gaussiana. Por lo tanto los valores críticos de los estadísticos empleados en la fase de detección en línea se calculan considerando como válida dicha suposición, aunque en la práctica generalmente no se satisface. Esta situación puede originarse por: la presencia de ruido no gaussiano, los sistemas de control retroalimentado, las diferentes transformaciones de los datos, etc. Con el fin de mejorar el desempeño del PCA en este caso, se desarrolló la técnica Análisis de Componentes Independientes (ICA), que calcula componentes estadísticamente independientes (CIs) y no gaussianos (Hyvärinen y col., 2001), lo que es una imposición mucho más severa que la simple correlación nula requerida a los CPs. A diferencia del PCA, ICA sí tiene restricciones relacionadas a la distribución de los datos de entrada, siendo necesario que las distribuciones de por lo menos $J - 1$ variables sean no-gaussianas. Otra diferencia importante es que los CIs no están sujetos a las restricciones de ortogonalidad requeridas a los CPs. Debido a esta última diferencia, algunos autores aseguran que los CIs son más apropiados para representar variables con distribuciones no-normales (Yoo y col., 2004). Lee y col. (2004) desarrollaron un procedimiento de MSPC basado en el ICA que utiliza tres estadísticos con fines de detección e identificación.

Otro conjunto importante de técnicas destinadas a monitorear procesos con datos no gaussianos utiliza mezclas de modelos gaussianos. Estos se basan en considerar que un proceso industrial puede describirse mediante varios modelos locales lineales. Con el fin de reducir la dimensionalidad del problema, dichos modelos se combinan con el PCA tradicional (Choi y col., 2005a; Ge y col., 2010a).

Los métodos tradicionales de MSPC también han asumido que las diferentes variables de proceso están correlacionadas entre sí de manera lineal. Esta suposición es válida para un

número importante de procesos industriales, los cuales operan en un entorno de la condición operativa nominal. En estos casos, aún si las relaciones entre las variables son no lineales, éstas pueden considerarse lineales alrededor de dicho punto operativo. Si la operación del proceso es más compleja, la detección de fallas se complica. Dado que existen diferentes tipos de relaciones no lineales entre las variables, resulta difícil formular un modelo no lineal unificado.

En el área de MSPC se ha abordado el monitoreo de sistemas no lineales empleando tres enfoques distintos. Uno de ellos consiste en utilizar modelos basados en redes neuronales y requiere resolver problemas de optimización no lineales. En tal sentido Kramer (1991) presentó un PCA No Lineal basado en una red neuronal autoasociativa de cinco capas (entrada, transformación, reducción, transformación inversa y salida). La extensión del PCA a sistemas no lineales se consiguió aplicando funciones no lineales a los nodos de las capas de transformación y transformación inversa. Las salidas de la capa de reducción son los CP no lineales. Con posterioridad, Dong y MacAvoy (1996) combinaron las curvas principales con las redes neuronales. Emplearon el método de las curvas principales para obtener los SCORES y los datos corregidos de las muestras de entrenamiento. Luego utilizaron el modelo desarrollado en base a redes neuronales para transformar las observaciones en los SCORES asociados y éstos en las mediciones corregidas. También se han desarrollado estrategias que combinan métodos de aprendizaje con redes neuronales con el fin de estudiar variaciones en la media y varianza (Wu y col., 2010).

Otro enfoque para el monitoreo de sistemas no lineales consiste en emplear métodos basados en kernels. Scholkopf propuso la estrategia Kernel PCA (KPCA) en 1998, y Choi y col. (2005b) la extendieron al monitoreo de procesos. Desde entonces, se ha publicado un número importante de trabajos en esta temática, dado que la mayoría de los procedimientos

que emplean PCA, PLS e ICA como estrategia básica han sido transformados en su versión no lineal.

El método KPCA consta de dos etapas fundamentales. En la primera se realiza el mapeo de los datos del espacio de las mediciones al hiperespacio de las características, y en la segunda se emplea el PCA tradicional para monitorear el proceso en línea. A diferencia de los métodos basados en redes neuronales, no involucra la solución de problemas de optimización no lineales. Entre las desventajas del KPCA merece citarse que el tiempo de cómputo incrementa con el número de muestras contenidas en la PR y que el patrón de los datos en el espacio de las características es de muy difícil interpretación en el espacio de las observaciones. Al igual que en la metodología PCA convencional, la detección de eventos anormales se basa en comparar los valores del D^2 y el SPE , apropiadamente redefinidos, con los valores críticos. En el Capítulo 2 de esta tesis, se proporcionan mayores detalles sobre las bases conceptuales y la implementación de la estrategia KPCA.

El tercer enfoque empleado para el monitoreo de sistemas no lineales consiste en aproximar el espacio no lineal mediante un conjunto de hiperplanos locales. Con tal fin, Kerschen y Golinval (2002) dividieron los datos de entrada mediante técnicas de agrupamiento y formularon un modelo lineal para cada región, observando que el primer autovalor acumula un valor muy alto de la varianza total de dicha región. Más recientemente, Ge y col. (2010c) propusieron definir $(R+1)$ subespacios lineales ortogonales, tales que los primeros R están asociados a cada una de las direcciones de los CPs retenidos en el PCA y el restante corresponde a la dirección promedio de los CPs excluidos. Las variables que participan en cada subespacio son las más correlacionadas con el respectivo CP. Dada una nueva observación, el procedimiento evalúa los estadísticos D^2 y el SPE en cada subespacio y utiliza un método de inferencia bayesiana para transformar estos dos valores en sus

respectivas probabilidades de falla para cada subespacio. Estas se emplean para calcular dos estadísticos globales usados en la fase de detección de eventos anormales.

El método de aproximaciones lineales es fácil de implementar, y los modelos lineales se interpretan de manera sencilla. En contrapartida, es posible que no ajusten todas las no-linealidades del proceso.

Si bien existen diferentes formas de abordar el monitoreo de sistemas no lineales empleando estrategias de MSPC, las metodologías desarrolladas para sistemas lineales aún tienen un rol de importancia, tanto en la academia como en la industria (Ge y col., 2013). Esto sucede porque numerosos procesos industriales se diseñan para obtener un producto con determinadas especificaciones, y sólo se permiten variaciones limitadas alrededor de las condiciones de producción. En este caso los modelos lineales se comportan adecuadamente. Por tal motivo, estrategias tales como PCA, PLS e ICA continúan siendo muy utilizadas en la industria.

1.2.1.2 Procesos discontinuos y semicontinuos

Cuando se consideran los procesos semicontinuos (semibatch) o discontinuos (batch), surgen complicaciones adicionales y bien diferenciadas de las inherentes a los sistemas continuos en la etapa de modelado. Estas se deben principalmente al ordenamiento del conjunto de datos que caracteriza a este tipo de procesos.

El comportamiento multivariado y dependiente del tiempo de los sistemas batch origina una estructura tridimensional de datos, ya que para realizar el análisis estadístico se debe disponer de los datos correspondientes a I batches. Estos forman la denominada PR, a partir de la cual se construye el modelo estadístico. Dichos datos se obtienen realizando un

conjunto de K observaciones de J variables para cada batch. Este conjunto de datos se ordena en un arreglo tridimensional $\underline{\mathbf{X}} \in \mathbb{R}^{I \times J \times K}$.

Nomikos y MacGregor (1994) extendieron la estrategia PCA clásica al monitoreo de procesos batch. Para ello implementaron el desdoblamiento “batch-wise” del arreglo tridimensional. Este consiste en reubicar las matrices correspondientes a cada una de las K observaciones una a la derecha de la otra en forma sucesiva, formando de esta manera una matriz bidimensional que conserva la dimensión del primer modo (filas) mientras que la del segundo (columnas) resulta del producto del número de variables (J) por el número de observaciones realizadas (K).

La facilidad de implementación del desdoblamiento batch-wise y de la interpretación de las matrices resultantes ha hecho que muchos autores eligieran este modo de desdoblamiento como punto de partida en sus trabajos. Sin embargo, esta metodología presenta algunos inconvenientes. En primer lugar, dado que generalmente el número de batches de los que se dispone es limitado, la matriz bidimensional producida por el desdoblamiento batch-wise tiene un número mucho más elevado de columnas que de filas, lo que resulta en una matriz de correlación poco confiable. En segundo lugar, la implementación en línea de la estrategia de monitoreo requiere proyectar cada individuo obtenido en tiempo real en el espacio de las VLs. Para ello, dicho individuo debe tener la misma dimensión que los batches incluidos en la base de datos a partir de la cual se construyó el modelo. Dado que durante el monitoreo en línea los batches todavía no están completos, es necesario hacer estimaciones de los valores futuros de las variables medidas, desde la observación siguiente a la actual ($k+1$) hasta la última (K).

Se han propuesto otros modelos con el objetivo fundamental de evitar la necesidad de predecir valores futuros para las observaciones. Una forma viable consiste en formular K

modelos locales, uno para cada observación k , a fin de describir adecuadamente la dependencia de las variables del proceso entre ellas y con el tiempo, a la vez que se continúa empleando el método de desdoblamiento batch-wise. La simplicidad del modelo local se basa en que contiene solamente la información de la observación k -ésima.

Cuando se considera una zona de influencia para cada modelo local, la idea de la utilización de ventanas móviles (ampliamente difundida en el área de control de procesos) fue propuesta por Lennox y col. (2001). La longitud de la ventana determina la porción de la historia previa de la operación asociada con dicho modelo.

Por su parte, Ramaker y col. (2005) introdujeron los modelos evolutivos. La metodología consiste en definir un modelo diferente para cada instante k que comprende todas las observaciones desde el inicio de la operación hasta k . De esta manera, toda la historia previa de la operación se incluye en el modelo. Las coordenadas del espacio obtenido para la primera observación resultan iguales tanto al utilizar un modelo evolutivo como uno local. Por otra parte, cuando se incluye finalmente la última observación, el modelo evolutivo es equivalente al propuesto por Nomikos y MacGregor (1994).

Para no incurrir en los errores de predicción de los valores futuros de las variables, Wold y col. (1998) emplearon un desdoblamiento vertical de la matriz de datos. Éste consiste en ubicar la matriz correspondiente a las observaciones del tiempo k debajo de la anterior, manteniendo así el número de variables y permitiendo la proyección de las observaciones a medida que las mismas están disponibles. En este trabajo, las matrices de proyección se obtienen de manera global, es decir, considerando las operaciones completas del principio al fin. Una solución a este problema fue introducida por Yoo y col. (2004). En su estrategia, el desdoblamiento del arreglo tridimensional se hace en dos etapas. En la primera, el desdoblamiento batch-wise se emplea para realizar el centrado y escalado de cada matriz

temporal. En la segunda, estas matrices se reordenan nuevamente una debajo de la otra, según lo propuesto por Wold y col. (1998). Cada una de las matrices temporales queda entonces estandarizada usando su propia media y desvío estándar en lugar de los parámetros globales.

Chen y Liu (2002) propusieron una metodología de monitoreo de procesos batch que evalúa la matriz de correlación de cada batch obtenida a partir de una matriz constituida por filas que contienen el vector de la medición actual (k) y un número fijo de vectores de observaciones previas. La matriz de correlación de todo el sistema surge de promediar las correspondientes a cada batch. De esta manera se construye un modelo dinámico con un número dado de intervalos de retraso que permite abordar la autocorrelación de los datos.

Por otra parte Rännar y col. (1991) presentaron una adaptación del enfoque jerárquico propuesto para procesos continuos, con el fin de incorporar la historia previa de la operación. Esta metodología utiliza modelos locales que incluyen el conocimiento previo del proceso en una fracción de la matriz de proyección. En cada modelo se asigna mayor influencia a las últimas observaciones, mientras que las mediciones previas van perdiendo importancia en forma paulatina mediante el empleo de un factor de suavizado.

Los enfoques y procedimientos para el tratamiento del arreglo tridimensional de datos citados previamente se utilizan como punto común de partida para la aplicación de diversas técnicas estadísticas multivariadas, que abordan el monitoreo de sistemas lineales, no lineales y con comportamiento no gaussiano. La elección del tipo de desdoblamiento tiene gran influencia en la capacidad de detección de la estrategia de monitoreo. En tal sentido, Camacho y col. (2009) analizaron la capacidad de detección de los modelos locales, los dinámicos con intervalo de retraso y los basados en el desdoblamiento batch-wise.

Además se han presentado metodologías de monitoreo aplicables a casos en los cuales existen fases y etapas múltiples en los procesos batch (Yao y Gao, 2009a; Camacho y col.,

2008). Un grupo de técnicas comprende los métodos Multiblock PCA/PLS, en los cuales las mediciones asociadas a diferentes etapas/fases operativas se separan de manera apropiada en distintos bloques, y se considera la correlación de las variables en cada bloque al mismo tiempo que la correlación entre bloques. Otro conjunto de técnicas modela cada fase en forma separada. También se han propuesto estrategias que consideran la variabilidad dinámica entre un batch y otro (Lu y col., 2005; Yao y Gao, 2009b).

Una vez formado el modelo empírico en el espacio de VLs, la fase de detección se realiza empleando los estadísticos propios de la estrategia seleccionada.

En relación con las metodologías que no transforman las variables originales (VOs), Mason y Young (2002) evaluaron el desempeño de las cartas de control del T^2 para dos casos particulares. Consideraron que las observaciones del proceso batch correspondían a la misma distribución normal multivariada, o a una serie de distribuciones normales multivariadas con diferente vector de media y la misma matriz de covarianza. Más tarde, Alvarez y col. (2010) presentaron la estrategia OSSBP (Original Space Strategy Batch Processes), destinada a monitorear sistemas en los cuales el vector de medias y la matriz de covarianza de las mediciones varían temporalmente durante la corrida del batch. Estos autores emplearon un modelo local para cada intervalo de muestro, teniendo en cuenta las conclusiones del trabajo de Ramaker y col. (2005), quienes comprobaron que los modelos locales y evolutivos tienen mejor desempeño que los globales para el monitoreo de procesos batch.

1.2.2 Identificación

Cuando un evento anormal se detecta, es necesario identificar el conjunto de observaciones mediante las cuales se revela esta condición. Dicha información resulta esencial para realizar luego el diagnóstico final del suceso no deseado.

En la etapa de identificación se determina el conjunto de observaciones que tienen mayor influencia en el valor de los estadístico empleados en la fase de detección, es decir, se establece el conjunto de mediciones que se consideran responsables de que el estadístico supere su valor crítico. Para tal fin, es práctica común calcular las contribuciones de las variables (CVs) al valor del estadístico. Por lo tanto, la complejidad de la etapa de identificación depende de la fórmula matemática del estadístico empleado para detectar la existencia de fallas.

El T^2 es ampliamente utilizado en el análisis de sistemas multivariados en general y en el campo del monitoreo de procesos en particular. Si bien se presenta como una herramienta muy útil para la detección de eventos anormales, por sí mismo no brinda ninguna información respecto de las posibles causas del desvío. Su fórmula matemática está compuesta, en su mayor parte, por productos cruzados de variables. Esto dificulta tanto su interpretación como el cálculo de la influencia de cada variable sobre su valor.

Mason y col. (1995, 1997) propusieron la descomposición del T^2 en el espacio original de las mediciones como una suma de J términos. El primero se calcula como el cuadrado del valor del estadístico de Student para la primera variable. El j -ésimo término ($j=1,2,\dots,J$) corresponde al estadístico ajustado con las medias y desvíos estándares de las correspondientes funciones de probabilidad condicional dadas las $j-1$ variables anteriores. Dado que no existe un ordenamiento fijo para las variables, pueden obtenerse hasta $J!$ particiones diferentes, aunque no independientes. La interpretación de los resultados resulta compleja dada la gran cantidad de términos que es necesario analizar, por ello los mismos autores propusieron tener en cuenta sólo dos términos para cada variable. El primero la considera en forma independiente del resto y el segundo corresponde a su distribución condicionada a los valores de los restantes $J-1$ descriptores. Otros grupos de trabajo

formularon metodologías alternativas, que constituyen casos particulares de la técnica propuesta por Mason y colaboradores (Maravelakis, 2003).

Con posterioridad, Alvarez y col. (2007) presentaron una metodología para descomponer el T^2 en una suma única de las CVs al mismo, que provee además una explicación sobre el significado físico de aquellas que son negativas. La estrategia evalúa la contribución de la j -ésima variable asumiendo que los valores de las restantes son fijos e iguales a sus observaciones. Estos autores determinaron los límites de control para las CVs, lo que permite la automatización de la etapa de identificación. Consideraron que, si se asume una distribución normal para las CVs, entonces el conjunto de variables sospechosas está formado por aquellas cuyas contribuciones están alejadas más de tres desvíos estándares respecto a sus valores medios en condiciones de operación normales. Además presentaron los resultados de diferentes análisis de desempeño de la metodología para casos de estudio complejos, los que mostraron las bondades de la técnica (Alvarez y col. 2010).

En relación con el D^2 , MacGregor y col. (1994) propusieron evaluar las CVs a los CPs que están fuera de sus límites de control. Esta metodología es análoga a considerar cada CP como una carta de control independiente, tomando ventaja del hecho de que los CPs no están correlacionados entre sí. Si bien este enfoque podría implementarse sin el perjuicio de no considerar la naturaleza multivariada del sistema para el caso de procesos continuos, ésta no es una alternativa conveniente para los procesos batch dado que presentan distintos niveles de correlación (globales y locales).

Nomikos (1996) y Miller y col. (1998) formularon el cálculo directo de las CVs al valor final del D^2 , en lugar de pesarlas por su participación en los CP dominantes, presentando los correspondientes gráficos de contribución, que permiten un análisis visual de las contribuciones más significativas. Además, Westerhuis y col. (2000) extendieron esta teoría

al caso de espacios latentes donde las direcciones podrían eventualmente no ser ortogonales. La CV se calcula considerando que las restantes tienen valores fijos e iguales a los observados. Estos autores introdujeron límites de control para las CVs, asumiendo que tienen distribución normal.

Posteriormente, Alcalá y Qin (2009) definieron la Contribución de la variable Basada en la Reconstrucción (RBC). Esta es la diferencia al cuadrado entre la observación de la variable y el valor de la misma obtenido cuando se minimiza el estadístico, considerando que las restantes tienen valores fijos e iguales a los observados. Dado que la RBC se calcula empleando una forma cuadrática, su función de densidad de probabilidad en condiciones de operación normales corresponde a la distribución χ^2 si las observaciones siguen una distribución normal estandarizada. Los autores compararon el desempeño de la RBC para la identificación de fallas individuales de sensores con respecto al conseguido empleando técnicas de proyección en estructuras latentes previas, y observaron un mejor comportamiento de la estrategia propuesta. Sin embargo el caso de estudio, generado de manera ad-hoc, presenta escasa dimensión. No se han reportado análisis de desempeño sistemáticos de las RBC para la identificación de variables sospechosas en conjuntos grandes de fallas, que afecten varias observaciones. Alcalá y Qin (2010) extendieron la metodología al KPCA, pero no propusieron ninguna estrategia de identificación automática, simplemente la inspección visual de los gráficos de contribución.

Recientemente Godoy y col. (2013) presentaron una estrategia simple para descomponer un estadístico de forma cuadrática en las CVs al mismo. Cada una de ellas contiene información del gradiente del estadístico normalizado en la dirección de la observación, es decir, asume que los valores de las restantes mediciones son fijos e iguales a sus observaciones. Dado que la estrategia emplea estadísticos normalizados con sus valores

críticos, se adoptó el valor 1 como límite de control para las CVs. Se utilizó la misma técnica para estimar de manera aproximada las CVs a los estadísticos empleados por la metodología Kernel PLS (Godoy y col., 2014). No se han presentado análisis de desempeño sistemáticos del procedimiento para casos de estudio complejos que involucren conjuntos de fallas grandes.

Con respecto al *SPE*, las fórmulas propuestas en la literatura para el cálculo de las CVs son simples y directas. Estas consideran el cuadrado de la diferencia entre los valores medidos de cada variable y los predichos por el modelo de VLs que esté siendo utilizado (Nomikos y MacGregor, 1994; Kourti y MacGregor, 1995; Nomikos y MacGregor, 1995; Westerhuis y col., 2000; Qin, 2003).

La revisión crítica de las metodologías existentes indica que se ha abordado una amplia variedad de problemas de monitoreo de procesos empleando técnicas estadísticas cada vez más sofisticadas. Sin embargo la identificación de las variables que revela el estado anómalo es aún un tema abierto a nivel académico, y la aplicación de complejas estrategias de MSPC en la industria es escasa.

Todas las estrategias actuales que aíslan el conjunto de variables sospechosas evalúan la CV al estadístico considerando fijos los valores de las restantes e iguales a sus valores observados. No existe un estudio de desempeño sistemático de las técnicas existentes, que involucre diferentes tipos de fallas de diversa magnitud.

El enfoque de MSPC que utiliza VOs no se ha desarrollado en la misma medida que el correspondiente al empleo de VLs, aunque se ha demostrado que si la matriz de correlación de los datos históricos no es singular, da resultados comparables a los obtenidos empleando metodologías basadas en PCA e ICA para la fase de detección, y mejores resultados para la etapa de identificación.

1.3 Objetivos

El objetivo de este trabajo de tesis es estudiar, desarrollar e implementar nuevas estrategias de MSPC para procesos continuos y discontinuos.

Se propone profundizar el estudio de las metodologías destinadas a identificar las variables que revelan el estado anómalo en el espacio de las VOs. Se pone especial énfasis en el desarrollo de técnicas que no estén sujetas a suposiciones, tales como: calcular la CV para valores fijos de las restantes observaciones o asumir que las mediciones tienen una distribución normal. También se pretende desarrollar estrategias simples cuya aplicación en el ámbito industrial resulte sencilla.

La comparación sistemática de los resultados alcanzados con las nuevas estrategias propuestas en esta tesis y los obtenidos con algunas de las existentes para un caso de estudio complejo es otro de los objetivos perseguidos.

1.4 Organización de la Tesis

El trabajo de tesis está organizado de la siguiente manera:

El presente capítulo contiene los objetivos y motivaciones de las tareas de investigación desarrolladas y proporciona una visión general sobre el estado del arte en el área del MSPC.

El Capítulo 2 presenta las técnicas básicas de monitoreo estadístico de procesos, tanto las de proyección en estructuras latentes, para sistemas lineales y no lineales, como aquellas que trabajan en el espacio de las VOs.

En el Capítulo 3 se propone una nueva metodología para estimar las contribuciones al estadístico T^2 cuando se trabaja en el espacio de las VOs y en el Capítulo 4 se extiende dicha metodología al monitoreo de procesos batch.

El Capítulo 5 describe el proceso de fermentación de penicilina semi-continuo, elegido como caso de estudio, y presenta también el desarrollo del modelo matemático del proceso y su implementación.

El Capítulo 6 muestra los resultados obtenidos al aplicar las estrategias desarrolladas en esta tesis al caso de estudio, la comparación de su desempeño con respecto a otras técnicas existentes y algunas conclusiones parciales que de ésta se desprenden.

El Capítulo 7 contiene las conclusiones generales, además de las recomendaciones acerca del trabajo futuro a realizar en esta temática.

1.5 Referencias

- (1) Alcalá, C.; Qin, S. J. Reconstruction-Based Contribution for Process Monitoring. *Automatica*, **2009**, *45*, 1593-1600.
- (2) Alcalá, C.; Qin, S. J. Reconstruction-Based Contribution for Process Monitoring with Kernel Principal Component Analysis. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2010**, *49*, 7849-7857.
- (3) Alvarez, C. R.; Brandolin, A.; Sánchez, M. C. On the Variable Contributions to the D-Statistic. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2007**, *88* (2), 189-196.
- (4) Alvarez, C. R.; Brandolin, A.; Sánchez, M. C. Batch process monitoring in the original measurement's space. *J. Process Control.* **2010**, *20*, 716-725.
- (5) Camacho, J.; Pico, J.; Ferrer, A. Multi-phase Analysis Framework for Handling Batch Process Data. *J. Chemom.* **2008**, *22*, 632-643.
- (6) Camacho, J.; Pico, J.; Ferrer, A. The Best Approaches in The Online Monitoring of Batch Processes Based on PCA: Does The Modeling Structure Matter? *Anal. Chim. Acta.* **2009**, *642*, 59-69.
- (7) Chen, J.; Liu, K. On-line Batch Process Monitoring Using Dynamic PCA and Dynamic PLS Models. *Chem. Eng. Sci.* **2002**, *14*, 63-75.
- (8) Choi, S. W.; Martin, E. B.; Morris, A. J. Fault Detection Based on a Maximum-Likelihood Principal Component Analysis (PCA) Mixture. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2005a**, *44*, 2316-2327.
- (9) Choi, S. W.; Lee, C.; Lee J. Park J.; Lee I. Fault Detection and Identification of Nonlinear Processes Based on Kernel PCA. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2005b**, *75*, 55-67.
- (10) Dong, D.; McAvoy, T. J. Nonlinear Principal Component Analysis-Based on Principal Curves and Neural Networks. *Comput. Chem. Eng.* **1996**, *20*, 65-78.
- (11) Ge, Z. Q.; Song, Z. H. Maximum-Likelihood Mixture Factor Analysis Model and its Application for Process Monitoring. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2010a**, *102*, 53-61.
- (12) Ge, Z. Q.; Song, Z. H. Mixture Bayesian Regularization Method of PPCA for Multimode Process Monitoring. *AIChE J.* **2010b**, *56*, 2838-2849.

- (13) Ge, Z. Q.; Zhang, M. G.; Song, Z. H. Nonlinear Process Monitoring Based on Linear Subspace and Bayesian Inference. *J. Process Control*. **2010c**, *20*, 676–688.
- (14) Ge, Z.; Song, Z.; Gao, F. Review of Recent Research on Data-Based Process Monitoring. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2013**, *52*, 3543–3562
- (15) Godoy, J.; Zumoffen, D.; Vega, J.; Marchetti, J. A Fault Detection and Diagnosis Technique for Multivariate Processes Using a PLS-Decomposition of the Measurement Space. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2013**, *128*, 25-36.
- (16) Godoy, J.; Zumoffen, D.; Vega, J.; Marchetti, J. New Contributions to Non-Linear Process Monitoring through Kernel Partial Least Squares. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2014**, *135*, 76-89.
- (17) Hotelling, H. The Generalization of Student's Ratio. *Ann. Math. Stat.* **1931**, *2* (3), 360-378.
- (18) Hwang, D. H.; Han, C. Real-Time Monitoring for a Process with Multiple Operating Modes. *Control Eng. Pract.* **1999**, *7*, 891–902.
- (19) Hyvärinen, A.; Karhunen, J.; Oja, E. *Independent Component Analysis*. Wiley-Interscience: New York, 2001.
- (20) Jackson, J. E. Principal Components and Factor Analysis: Part I - Principal Components. *J. Quality Technology*. **1980**, *12* (4), 201-213.
- (21) Jackson, J. E. *A User's Guide to Principal Components*. Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics: New York, 1991.
- (22) Kerschen, G.; Golinval, J. C. Non-Linear Generalization of Principal Component Analysis: from a Global to a Local Approach. *J. Sound Vibrat.* **2002**, *254*, 867–876.
- (23) Kourti, T.; MacGregor, J. F. Process Analysis, Monitoring and Diagnosis, Using Multivariate Projection Methods. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1995**, *28* (1), 3-21.
- (24) Kramer, M. A. Nonlinear Principal Component Analysis Using Autoassociative Neural Networks. *AIChE J.* **1991**, *37*, 233-243.
- (25) Kruger, U.; Zhou, Y. Q.; Irwin, G. W. Improved Principal Component Monitoring of Large-Scale Processes. *J. Process Control*. **2004**, *14*, 879–888.
- (26) Ku, W.; Storer, R. H.; Georgakis, C. Disturbance Rejection and Isolation by Dynamic Principal Component Analysis. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1995**, *30*, 179–196.

- (27) Lee, J. M.; Yoo, C.; Lee, I. B. Statistical Process Monitoring with Independent Component Analysis. *J. Process Control*. **2004**, *14* (5), 467-485.
- (28) Lennox, B.; Montague, G. A.; Hiden, H. G.; Kornfeld, G.; Goulding, P. R. Process Monitoring of an Industrial Fed-Batch Fermentation. *Biotechnol Bioeng*. **2001**, *74* (2), 125-135.
- (29) Li, W.; Yue, H.; Valle-Cervantes, S.; Qin, S. J. Recursive PCA for Adaptive Process Monitoring. *J. Process Control*. **2000**, *10* (5), 471-486.
- (30) Lu, N. Y.; Yao, Y.; Gao, F. R.; Wang, F. L. Two-Dimensional Dynamic PCA for Batch Process Monitoring. *AIChE J*. **2005**, *51*, 3300–3304.
- (31) MacGregor, J. F.; Jaeckle, C.; Kiparissides, C.; Koutoudi, M. Process Monitoring and Diagnosis by Multiblock PLS Methods. *AIChE J*. **1994**, *40* (5), 826-838.
- (32) Maravelakis, P. An Investigation of Some Characteristics of Univariate and Multivariate Control Charts. Ph.D. Thesis, Athens University of Economics and Business, Department of Statistics, 2003.
- (33) Mason, R. L.; Tracy, N. D.; Young, J. C. Decomposition of T^2 for Multivariate Control Chart Interpretation. *J. Qual. Technol.* **1995**, *27* (2), 99-108.
- (34) Mason, R. L.; Tracy, N. D.; Young, J. C. A Practical Approach for Interpreting Multivariate T^2 Control Chart Signals. *J. Qual. Technol.* **1997**, *29* (4), 396-406.
- (35) Mason, R. L.; Young, J. C. *Multivariate Statistical Process Control with Industrial Applications*. SIAM: Philadelphia, 2002.
- (36) Miller, P.; Swanson, R. E.; Heckler, C. F. Contribution Plots: The Missing Link in Multivariate Quality Control. *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci.* **1998**, *8* (4), 775-792.
- (37) NIST/Sematech. *e-Handbook of Statistical Methods* [Online]; 2008. <http://www.itl.nist.gov/div898/hadbook/>.
- (38) Nomikos, P.; MacGregor, J. F. Monitoring of Batch Process Using Multiway Principal Component Analysis. *AIChE J*. **1994**, *40* (8), 1361-1375.

- (39) Nomikos, P.; MacGregor, J. F. Multivariate SPC Charts for Monitoring Batch Processes. *Technometrics*. **1995**, *37* (1), 41-59.
- (40) Nomikos, P. Detection and Diagnosis of Abnormal Batch Operations Based on Multi-Way Principal Component Analysis. *ISA Trans.* **1996**, *35* (3), 259-266.
- (41) Odiowei, P. P.; Cao, Y. State-Space Independent Component Analysis for Nonlinear Dynamic Process Monitoring. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2010**, *103*, 59–65.
- (42) Qin, S. J.; Valle S.; Piovoso, M. J. On Unifying Multiblock Analysis with Application to Decentralized Process Monitoring. *J. Chemom.* **2001**, *15* (9), 715-742
- (43) Qin, S. J. Statistical Process Monitoring: Basics and Beyond. *J. Chemom.* **2003**, *17* (8-9), 480–502.
- (44) Ramaker, H. J.; Van Sprang, E. N. M.; Westerhuis, J. A.; Smilde, A. K. Fault Detection Properties of Global, Local and Time Evolving Models for Batch Process Monitoring. *J. Process Control.* **2005**, *15* (7), 799-805.
- (45) Rännar, S.; MacGregor, J. F.; Wold, S. Adaptive Batch Monitoring Using Hierarchical PCA. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1991**, *41* (1), 73-81.
- (46) Schölkopf, B.; Smola, A.; Muller, K.R. Nonlinear Component Analysis as a Kernel Eigenvalue Problem. *Neural Comput.* **1998**, *10*, 1299-1319.
- (47) Singhai, A.; Seborg, D. E. Evaluation of a Pattern Matching Method for the Tennessee Eastman Challenge Process. *J. Process Control.* **2006**, *16*, 601–613.
- (48) Venkatasubramanian, V.; Rengaswamy, R.; Kavuri, S.; Yin, K. A Review of Process Fault Detection and Diagnosis. Part III: Process History Based Methods. *Comput. Chem. Eng.* **2003**, *27*, 327-346.
- (49) Wang, X.; Kruger, U.; Irwin, G. W. Process Monitoring Approach Using Fast Moving Window PCA. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2005**, *44*, 5691–5702.
- (50) Wangen, L. E.; Kowalski, B. R. A Multiblock Partial Least Squares Algorithm for Investigating Complex Chemical Systems. *J. Chemom.* **1988**, *3* (1), 3-20.
- (51) Westerhuis, J. A.; Kourti, T.; MacGregor, J. F. Analysis of Multiblock and Hierarchical PCA and PLS Models. *J. Chemom.* **1998**, *12* (5), 301-321.

- (52) Westerhuis, J. A.; Gurden, S. P.; Smilde, A. K. Generalized Contribution Plots in Multivariate Statistical Process Monitoring. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2000**, *51* (1), 95-114.
- (53) Wold, S. Exponentially Weighted Moving Principal Components Analysis and Projections to Latent Structures. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1994**, *23* (1), 149-161.
- (54) Wold, S.; Kettaneh, N.; Friden, H.; Holmberg, A. Modelling and Diagnostics of Batch Processes and Analogous Kinetic Experiments. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1998**, *44* (1-2), 331-340.
- (55) Wu, B.; Yu, J. B. A Neural Network Ensemble Model for On-line Monitoring of Process Mean and Variance Shifts in Correlated Processes. *Expert Syst. Appl.* **2010**, *37*, 4058–4065.
- (56) Yao, Y.; Gao, F. A Survey on Multistage/Multiphase Statistical Modeling Methods for Batch Processes. *Annu. Rev. Control.* **2009a**, *33*, 172-183.
- (57) Yao, Y.; Gao, F. R. Multivariate Statistical Monitoring of Multiphase Two-Dimensional Dynamic Batch Processes. *J. Process Control.* **2009b**, *19*, 1716–1724.
- (58) Yoo, C. K.; Lee, D. S.; Vanrolleghem, P.A. Application of Multiway ICA for On-line Process Monitoring of a Sequencing Batch Reactor. *Water Res.* **2004**, *38* (7), 1715-1732.
- (59) Zhao, S. J.; Zhang, J.; Xu, Y. M. Monitoring of Processes with Multiple Operation Modes through Multiple Principle Component Analysis Models. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2004**, *43*, 7025–7035.

Capítulo 2

2 TÉCNICAS BÁSICAS DE MONITOREO ESTADÍSTICO DE PROCESOS 33

2.1	Introducción.....	33
2.2	Monitoreo en el Espacio de las Variables Originales.....	34
2.2.1	Método de Mason, Young y Tracy.....	37
2.2.2	Estrategia en el Espacio Original	39
2.2.3	Implementación de la Estrategia de Monitoreo OSS	42
2.2.3.1	Etapa I	42
2.2.3.2	Etapa II	43
2.3	Monitoreo en el Espacio de las Variables Latentes.....	43
2.3.1	Análisis de Componentes Principales	44
2.3.2	Implementación de la Estrategia de Monitoreo PCA.....	55
2.3.2.1	Etapa I	55
2.3.2.2	Etapa II.....	56
2.3.3	Análisis de Componentes Principales Kernel	57
2.3.4	Implementación de la Estrategia de Monitoreo KPCA.....	65
2.3.4.1	Etapa I	65
2.3.4.2	Etapa II	65
2.4	Conclusiones	66
2.5	Referencias.....	68

Página en Blanco

2 Técnicas Básicas de Monitoreo Estadístico de Procesos

2.1 Introducción

En esta tesis la amplia diversidad de estrategias existentes para realizar el monitoreo estadístico de procesos se ha dividido en dos grandes grupos. El primero comprende los métodos que utilizan los valores de las mediciones del proceso, o Variables Originales (VOs), de manera directa. El segundo incluye las técnicas que emplean las proyecciones de las observaciones en diferentes espacios de Variables Latentes (VLs).

En este capítulo se presentan las metodologías básicas de detección e identificación de fallas para algunas de las estrategias de monitoreo propuestas en cada grupo. Diferentes variantes de estas metodologías básicas han sido empleadas con el fin de monitorear procesos continuos (operando en estado estacionario o dinámico), semicontinuos (semibatch) y discontinuos (batch). Cabe aclarar además que el estudio no comprende técnicas destinadas a monitorear variables de calidad de manera explícita.

En relación con los métodos que inspeccionan el proceso empleando las VOs, se analizan las metodologías básicas de las estrategias presentadas por Mason y col. (1995, 1997) y Alvarez y col. (2007). Con respecto a los métodos de proyección en estructuras latentes, inicialmente se introduce el Análisis de Componentes Principales (PCA) (Anderson, 1958; Jackson, 1991) dado que la mayoría de las estrategias pertenecientes a este grupo se han derivado en base a esta técnica. Luego se presenta el Análisis de Componentes Principales Kernel (KPCA), propuesto por Schölkopf y col. (1998), que combina los métodos Kernel con el PCA. Su estudio y aplicación se ha extendido en la última década ya que permite abordar las relaciones altamente no lineales de los sistemas. A continuación se presentan los

conceptos básicos de las metodologías previamente citadas, así como otros relacionados con su implementación.

2.2 Monitoreo en el Espacio de las Variables Originales

En un proceso industrial generalmente se necesita monitorear un conjunto de variables correlacionadas. Dicha correlación origina que los resultados de las técnicas de análisis estadístico univariado, que sólo analizan cada variable de manera individual, resulten confusos. Para superar esta dificultad, Hotelling (1931) introdujo una extensión del estadístico univariado de Student al caso multivariado. El así llamado Estadístico de Hotelling (T^2) es una forma cuadrática basada en la distancia de Mahalanobis. Las relaciones entre las variables se consideran mediante la matriz de covarianza, que se utiliza para ponderar la distancia relativa entre un punto dado y la media muestral. El T^2 ha sido usado extensamente como una herramienta de análisis tanto para comparar poblaciones de datos como para clasificar una observación como proveniente de una de varias poblaciones.

La fórmula del estadístico T^2 involucra la inversa de matriz de correlación muestral. Esta debe ser no singular, y en consecuencia, invertible. Cuando dos o más variables observadas están perfectamente correlacionadas o cercanas a la correlación total, el cálculo del estadístico T^2 falla. Para identificar co-linealidades se recomienda calcular los índices de condición de la matriz de covarianza, definidos como la raíz cuadrada de la relación del máximo autovalor con respecto a cada uno de los otros autovalores (Mason y Young, 2002). Existe una co-linealidad severa si un índice de condición es superior a 30; en tal caso una de las variables que intervienen en la correlación se elimina. Para determinar el conjunto de variables colineales, se analiza la combinación lineal de variables proporcionada por el autovector asociado al menor autovalor. Luego de ignorar las variables con los menores coeficientes, se obtiene la relación lineal entre aquellas que producen el problema de co-linealidad. Otro

método para remover co-linealidades consiste en reconstruir la inversa de la matriz de covarianza mediante la exclusión de los autovectores correspondientes a los autovalores cercanos a cero. Si bien se han propuesto diferentes técnicas de regularización de matrices para resolver este problema (Bickel y col., 2008), su análisis está fuera del alcance de esta tesis. Las restricciones de muestreo también originan la singularidad de la matriz de covarianza muestral. En este trabajo de investigación se considera que dicha matriz no es singular.

En relación con el monitoreo de procesos, el valor del T^2 es una medida de la forma en la que una nueva observación viola la estructura de correlación observada en la Población de Referencia (PR) formada a partir de datos operativos históricos. Por lo tanto, resulta útil para evaluar si las desviaciones que se observan en un proceso pueden o no considerarse dentro de la variabilidad normal del mismo.

Consideremos un proceso en el cual J variables se miden y monitorean en el tiempo. Si el vector \mathbf{z} comprende todas las mediciones para un dado instante de tiempo t , el valor del T^2 para \mathbf{z} está dado por:

$$T^2 = (\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})^T \mathbf{S}^{-1} (\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}}), \quad (2.1)$$

donde $\bar{\mathbf{z}}$ es la estimación de la media poblacional ($\boldsymbol{\mu}$) y \mathbf{S} es la estimación de la matriz de varianza-covarianza poblacional ($\boldsymbol{\Sigma}$). Como puede verse en la ecuación previa, el T^2 posee una forma cuadrática con el mínimo en $\mathbf{z} = \bar{\mathbf{z}}$. Además si la matriz \mathbf{S} es semidefinida positiva, todos los posibles valores de \mathbf{z} generan valores de estadísticos mayores o iguales a cero.

Cuando es posible asumir que \mathbf{z} sigue una distribución normal multivariada ($\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$), entonces el T^2 sigue una distribución:

$$\frac{J(I^2 - 1)}{(I^2 - IJ)} \mathcal{F}_{J, I-J}, \quad (2.2)$$

donde $\mathcal{F}_{J, I-J}$ representa la distribución \mathcal{F} con grados de libertad J e $(I-J)$, siendo I el número de observaciones de la PR. Si se emplea el vector de observación estandarizado \mathbf{x} , de tal manera que $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{\Omega})$ siendo $\mathbf{\Omega}$ la matriz de correlación poblacional, entonces el T^2 se evalúa mediante la siguiente ecuación:

$$T^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x}, \quad (2.3)$$

donde \mathbf{R} es la matriz de correlación muestral, y su función de densidad de probabilidad (pdf) se corresponde también con la Ec. (2.2). Se considera que el proceso se encuentra fuera de control estadístico si el T^2 supera su valor crítico, T_c^2 . Este es el valor del estadístico cuya probabilidad acumulada es igual a $(1-\alpha)$, siendo α el nivel de significado del test de hipótesis.

Alvarez y col. (2007) evitaron suponer conocida la distribución de probabilidad de las observaciones, por lo tanto calcularon el T^2 para cada una de las muestras contenidas en la PR y estimaron el T_c^2 mediante el método Kernel Density Estimation (KDE) explicado en el Apéndice 2.

Si una observación muestra un comportamiento anormal, entonces todos los esfuerzos se orientan hacia la búsqueda del origen del problema. Tal como se explicó en el capítulo anterior, las actividades relacionadas con el aislamiento de las variables que señalan el estado de falla conforman la etapa de identificación del procedimiento de monitoreo. Dicha identificación se realiza frecuentemente mediante el cálculo de las Contribuciones de las Variables (CVs) al estadístico utilizado en la fase de detección. Estas muestran la influencia

relativa de cada observación sobre el valor final del estadístico y se considera que la falla se revela por medio de las variables cuyas contribuciones son las mayores.

A continuación se presentan diferentes estrategias propuestas para asignar los valores de las CVs al T^2 , que tienen en cuenta la naturaleza multivariada de los datos del proceso.

2.2.1 Método de Mason, Young y Tracy

Mason y col. (1995, 1997) propusieron una metodología para la descomposición del T^2 que permite estimar el efecto de cada una de las observaciones sobre el valor final de esta métrica. Dichos autores consideraron que el T^2 está formado por J términos que representan las CVs al valor del estadístico. Cada sumando es la distancia entre el valor medido y el valor medio de una observación, considerando las distribuciones condicionales que resultan de asumir como constantes los valores de las $(J-1)$ variables restantes. Al fijar los valores de dichas variables en sus valores medidos, el entorno que define la región normal donde la j -ésima variable puede moverse se reduce considerablemente, tal como muestra la Figura 2.1.

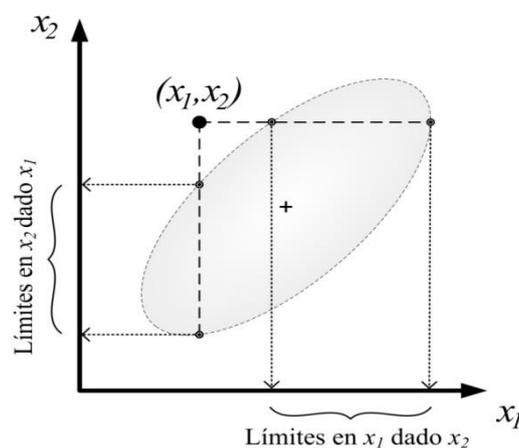


Figura 2.1: Límites para x_1 y x_2 considerando sus distribuciones condicionales

La descomposición propuesta por Mason y col. (1995, 1997) toma como punto de partida la forma del T^2 representada en la siguiente ecuación:

$$T^2 = \sum_{d=1}^J \sum_{b=1}^J a_{d,b} x_d x_b, \quad (2.4)$$

donde $a_{d,b}$ es un elemento de la inversa de la matriz \mathbf{R}

$$\mathbf{R}^{-1} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,J} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{J,1} & \cdots & a_{J,J} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

El estadístico se descompone como una sumatoria de J partes independientes:

$$T^2 = (t_1^S)^2 + T_{2 \bullet 1}^2 + T_{3 \bullet 1,2}^2 + T_{4 \bullet 1,2,3}^2 + \dots + T_{J \bullet 1,2,\dots,J-1}^2, \quad (2.6)$$

donde t_1^S es el valor del estadístico de Student de la primera variable seleccionada, y $T_{j+1 \bullet 1,\dots,j}^2$ es la contribución de la $(j+1)$ -ésima variable calculada mediante una expresión similar a la de su estadístico de Student. Esta emplea estimaciones de su media y desvío estándar basadas en su distribución de probabilidad condicional dadas las j variables anteriormente consideradas. Debido a que no existe un orden fijo de las variables, es posible obtener $J!$ particiones diferentes (pero no independientes) del T^2 .

Cada uno de los ordenamientos resultantes de las variables produce el mismo valor final para T^2 , pero los términos ortogonales que conforman la partición de T^2 son diferentes en cada ordenamiento particular. Es posible corroborar que existen sólo $J \times 2^{(J-1)}$ términos independientes entre los $J \times J!$ términos que deberían ser evaluados como contribuciones potenciales al T^2 . De esta manera, la metodología produce resultados diferentes para las contribuciones condicionales $T_{j \bullet 1,\dots,j-1}^2$ según sea la ubicación de cada variable en el vector de observaciones. Para eliminar estas ambigüedades, los mismos autores proponen considerar sólo dos términos para cada variable: su contribución individual y el término condicional que

resulta de considerar los restantes ($J-1$) términos como valores dados, tal como se muestra en la siguiente ecuación:

$$T^2 = t_1^2 + \sum_{j=1}^{J-1} T_{j+1, \dots, j}^2. \quad (2.7)$$

2.2.2 Estrategia en el Espacio Original

Alvarez y col. (2007) presentaron un método alternativo para descomponer el T^2 en una suma única de contribuciones en el espacio de las VOs, en base al cual desarrollaron la técnica de monitoreo Original Space Strategy (OSS). La metodología provee además una explicación sobre el significado físico de las contribuciones negativas al estadístico.

Mediante una reformulación de la Ec. (2.4), el T^2 se expresa en función de la j -ésima variable de la siguiente manera:

$$T^2 = T_j^2 = a_{j,j} \dot{x}_j^2 + \left(2 \sum_{\substack{b=1 \\ b \neq j}}^J a_{j,b} \dot{x}_b \right) \dot{x}_j + \sum_{\substack{d=1 \\ d \neq j}}^J \sum_{\substack{b=1 \\ b \neq j}}^J a_{d,b} \dot{x}_d \dot{x}_b. \quad (2.8)$$

siendo

$$\dot{x}_j = z_j - \bar{z}_j. \quad (2.9)$$

Esta representación del T^2 evidencia el efecto de la j -ésima medición en el valor final del estadístico, para un valor dado de las restantes ($J-1$) observaciones.

El valor \dot{x}_j^* que produce un estadístico mínimo (T_j^{2MIN}), cuando los valores de las restantes ($J-1$) mediciones están fijos en sus valores observados, se evalúa derivando la expresión (2.8) con respecto a \dot{x}_j e igualando la derivada a cero. Las ecuaciones resultantes para \dot{x}_j^* y T_j^{2MIN} son las siguientes:

$$\dot{x}_j^* = -\frac{\sum_{\substack{b=1 \\ b \neq j}}^J a_{j,b} \dot{x}_b}{a_{j,j}}, \quad (2.10)$$

$$T_j^{2MIN} = -\frac{\left(\sum_{\substack{b=1 \\ b \neq j}}^J a_{j,b} \dot{x}_b\right)^2}{a_{j,j}} + \sum_{\substack{d=1 \\ d \neq j}}^J \sum_{\substack{b=1 \\ b \neq j}}^J a_{d,b} \dot{x}_d \dot{x}_b = -a_{j,j} \dot{x}_j^{*2} + \sum_{\substack{d=1 \\ d \neq j}}^J \sum_{\substack{b=1 \\ b \neq j}}^J a_{d,b} \dot{x}_d \dot{x}_b. \quad (2.11)$$

Sumando T_j^{2MIN} para $j=1 \dots J$ se obtiene la siguiente ecuación:

$$\sum_{j=1}^J T_j^{2MIN} = (J-2)T^2 + \sum_{j=1}^J a_{j,j} (\dot{x}_j^2 - \dot{x}_j^{*2}). \quad (2.12)$$

de la cual se despeja el T^2 como la suma de las contribuciones de cada variable, $c_j^{T^2}$ ($j=1, \dots, J$):

$$T^2 = \sum_{k=1}^J \frac{a_{j,j}}{2} \left[(\dot{x}_j - \dot{x}_j^*)^2 + (\dot{x}_j^2 - \dot{x}_j^{*2}) \right] = \sum_{j=1}^J a_{j,j} (\dot{x}_j^2 - \dot{x}_j^* \dot{x}_j) = \sum_{j=1}^J c_j^{T^2}, \quad (2.13)$$

$$c_j^{T^2} = a_{j,j} (\dot{x}_j^2 - \dot{x}_j^* \dot{x}_j) = a_{j,j} \left(\dot{x}_j^2 + \frac{\dot{x}_j}{a_{j,j}} \sum_{\substack{b=1 \\ b \neq j}}^J a_{j,b} \dot{x}_b \right). \quad (2.14)$$

La $c_j^{T^2}$ se representa gráficamente en la Figura 2.2. Se observa que tiene una forma cuadrática con raíces ubicadas en $\dot{x}_j = 0$ ($z_j - \bar{z}_j = 0$) y $\dot{x}_j = \dot{x}_j^*$.

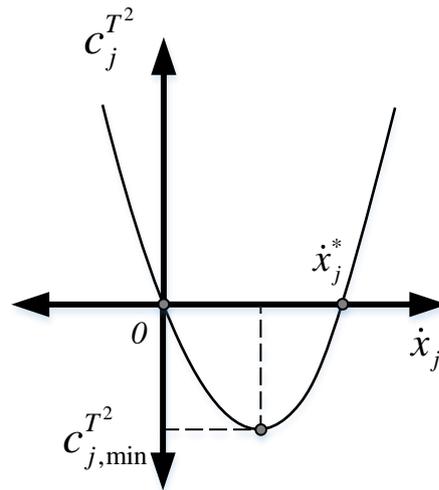


Figura 2.2 Contribución de la j -ésima variable al estadístico T^2

Esta representación ayuda a comprender el significado físico de las $c_j^{T^2}$ negativas y por lo tanto a estimar una cota para ellas. Las $c_j^{T^2}$ que se encuentran entre $0 < \dot{x}_j < \dot{x}_j^*$ presentan valores negativos con un valor mínimo ($c_{j,min}^{T^2}$) ubicado en $\dot{x}_j = \frac{\dot{x}_j^*}{2}$. Para valores de \dot{x}_j fuera de dicho rango, las $c_j^{T^2}$ son positivas e incrementan con $|\dot{x}_j|$.

Con el fin de aislar el conjunto de variables sospechosas, Alvarez y col. (2007) emplearon los datos contenidos en la PR para calcular el valor medio, \bar{c}_j , y la varianza, $\text{var}(c_j^{T^2})$, de la contribución de la j -ésima variable ($j=1 \dots J$) al valor del T^2 de la siguiente manera:

$$\bar{c}_j^{T^2} = \frac{\sum_{i=1}^I c_{j,i}^{T^2}}{I}, \tag{2.15}$$

$$\text{var}(c_j^{T^2}) = \frac{\sum_{i=1}^I (c_{j,i}^{T^2} - \overline{c_j^{T^2}})^2}{I-1}. \quad (2.16)$$

e identificaron la j -ésima medición como sospechosa si excede el límite de control, $\tau_j^{T^2}$, que se calcula en función de la regla empírica de los “tres desvíos estándares”, asumiendo que la CV sigue una distribución normal:

$$\tau_j^{T^2} = \overline{c_j^{T^2}} + 3 \times \sqrt{\text{var}(c_j^{T^2})}. \quad (2.17)$$

2.2.3 Implementación de la Estrategia de Monitoreo OSS

A continuación se detallan aspectos relacionados a la implementación de la estrategia OSS para las Etapas I y II. Esta metodología se selecciona dentro del grupo de las estrategias de monitoreo en el espacio de las VOs por su mejor desempeño en relación con el método de Mason, Young y Tracy (Alvarez, 2009).

2.2.3.1 Etapa I

Como se mencionó en el capítulo anterior, en la Etapa I se obtiene un modelo del proceso en condiciones de operación normales en base a los datos históricos de la planta incluidos en la PR. Para la estrategia OSS, dicho modelo está representado por \mathbf{R} , T_c^2 , y $\tau_j^{T^2}$ ($j=1 \dots J$).

A partir de datos históricos del proceso se seleccionan I muestras de J observaciones que constituyen la PR. Esta se representa mediante una matriz $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{I \times J}$. Luego se calcula $\bar{\mathbf{z}}$ y el vector de desvíos estándares muestrales, $\boldsymbol{\sigma}_z$, con los cuales se estandariza \mathbf{Z} . Los datos de la PR centrados y escalados forman la matriz \mathbf{X} . Posteriormente se evalúa la matriz de

correlación de \mathbf{X} , \mathbf{R} , y se la invierte. Se almacenan los vectores $\bar{\mathbf{z}}$ y $\boldsymbol{\sigma}_z$ y la inversa de la matriz de correlación, \mathbf{R}^{-1} .

Además la matriz \mathbf{X} se emplea para determinar el T_c^2 para un dado nivel de significación α . Se utiliza la técnica KDE para determinar el valor del estadístico tal que su probabilidad acumulada es $(1 - \alpha)$ y se lo almacena. En esta etapa también se calculan los $\tau_j^{T^2}$ ($j=1 \dots J$) aplicando la Ec.(2.17).

2.2.3.2 Etapa II

Durante la Etapa II, cada nueva observación \mathbf{z} se centra y estandariza utilizando los vectores $\bar{\mathbf{z}}$ y $\boldsymbol{\sigma}_z$, respectivamente. Luego se calcula el T^2 en función de la nueva medición estandarizada y \mathbf{R}^{-1} . Si se excede el valor crítico del estadístico durante 3 instantes consecutivos, se realiza la identificación de las variables sospechosas. Se calculan las CVs al valor del T^2 (Ec. (2.14)) y se las compara con sus límites de control. Aquellas variables que verifican la condición $c_j^{T^2} > \tau_j^{T^2}$ son las que revelan la falla del proceso.

2.3 Monitoreo en el Espacio de las Variables Latentes

El seguimiento de la operación de procesos químicos empleando modelos empíricos expresados en términos de VLs es ampliamente utilizado con el fin de abordar el monitoreo de sistemas con un número grande de observaciones correlacionadas. Como se mencionó en el capítulo anterior, su empleo se centra en la posibilidad de analizar el comportamiento del proceso empleando un conjunto reducido de variables tales que retienen la mayor parte de la información significativa del sistema.

Dentro del grupo de estrategias de monitoreo que emplean VLs, sin involucrar de manera explícita las variables de calidad, se destaca el PCA. Tomando como base esta técnica se han desarrollado un gran número de estrategias que inspeccionan la operación de procesos de naturaleza muy diversa.

2.3.1 Análisis de Componentes Principales

El PCA es un procedimiento estadístico que emplea una transformación ortogonal para convertir un conjunto de observaciones posiblemente correlacionadas en un conjunto de valores correspondientes a variables linealmente no correlacionadas, denominadas Componentes Principales (CPs). El número de CPs es menor o igual al número de VOs. Dicha transformación se define de manera tal que el primer CP tiene la mayor varianza posible, es decir explica o describe tanta variabilidad de los datos como sea posible, y los CPs subsiguientes, de a uno a la vez, tienen la máxima varianza posible y son ortogonales a los CPs precedentes.

La principal ventaja de esta técnica se centra en la posibilidad de lograr reducciones importantes en la dimensionalidad del sistema, dado que la mayor parte de la información significativa se mantiene en unos pocos CPs y es posible excluir del análisis aquellas direcciones que no contienen una cantidad de información relevante. Esta reducción de la dimensión del problema resulta útil para visualizar y procesar vectores de observaciones con muchos componentes, a la vez que se mantiene una dada cantidad de varianza del sistema.

Dado un conjunto de datos históricos del proceso estandarizados, contenidos en la matriz \mathbf{X} , la aplicación de la técnica permite determinar las direcciones de los CPs por resolución del siguiente problema de optimización:

$$\begin{aligned} \underset{\mathbf{p}}{\text{Max}} \quad & E\{\bar{\mathbf{p}}^T \mathbf{x}\}^2 = E\{\bar{\mathbf{p}}^T \mathbf{x} \mathbf{x}^T \bar{\mathbf{p}}\} = \bar{\mathbf{p}}^T \mathbf{\Omega} \bar{\mathbf{p}}, \\ \text{s.a.} \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\bar{\mathbf{p}}_j^T \bar{\mathbf{p}}_j = 1, \quad \forall j = 1, 2, \dots, J, \quad (2.19)$$

$$E\{\bar{\mathbf{p}}_{j+1}^T \mathbf{x}\}^2 \geq E\{\bar{\mathbf{p}}_j^T \mathbf{x}\}^2, \quad \forall j = 1, 2, \dots, J, \quad (2.20)$$

donde $\bar{\mathbf{p}}_j$ son los vectores columna de la matriz de cambio de coordenadas $\bar{\mathbf{P}}$ que define el espacio de variables latentes, $E\{\cdot\}$ es el valor esperado de su argumento y se emplea la matriz de correlación muestral \mathbf{R} como estimación de $\mathbf{\Omega}$. Cada uno de los $\bar{\mathbf{p}}_j$ define la j -ésima dirección del espacio latente.

La solución del problema de optimización puede obtenerse en forma analítica usando los resultados del Teorema 2.1 (Anderson, 1958):

Teorema 2.1

Sea \mathbf{x} un vector aleatorio tal que $\mathcal{E}\{\mathbf{x}\} = \mathbf{0}$ y $\mathcal{E}\{\mathbf{x}\mathbf{x}^T\} = \mathbf{\Omega}$. Existe entonces una transformación lineal ortogonal $\mathbf{u} = \bar{\mathbf{P}}^T \mathbf{x}$ tal que la matriz de correlación de \mathbf{u} es $\mathcal{E}\{\mathbf{u}\mathbf{u}^T\} = \bar{\mathbf{\Lambda}}$, con $\bar{\mathbf{\Lambda}} = \text{diag}([\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_J]^T)$ y donde $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_J \geq 0$ son las raíces de la ecuación característica $|\mathbf{R} - \lambda \mathbf{I}| = 0$.

Del Teorema 2.1 surge que λ_j es el j -ésimo autovalor de la matriz de correlación \mathbf{R} , dado que es una de las raíces de la ecuación característica $|\mathbf{R} - \lambda \mathbf{I}| = 0$, siendo \mathbf{I} una matriz identidad de dimensiones $(J \times J)$. Así, el espacio de los CPs correspondiente a un dado conjunto de datos está definido por la matriz de autovectores asociada a la matriz de correlación de dichos datos. Este resultado se emplea para proponer la obtención de una base

del espacio de los CPs mediante la descomposición en valores singulares de la matriz \mathbf{R} , esto es:

$$\mathbf{R} = \bar{\mathbf{P}}\bar{\mathbf{\Lambda}}\bar{\mathbf{P}}^T, \quad (2.21)$$

donde $\bar{\mathbf{P}}$ es la matriz de autovectores asociada a \mathbf{R} y es la misma que resulta de la solución del problema de optimización. Por otra parte, la traza de la matriz \mathbf{R} es igual a la varianza total del sistema, tal como surge de la Ec. (2.22) al aplicar las propiedades de la traza de una matriz en su forma canónica

$$\sigma_T^2 = tr(\mathbf{R}) = \sum_{j=1}^J \sigma_j^2 = \sum_{j=1}^J \lambda_j = tr(\bar{\mathbf{\Lambda}}) = J, \quad (2.22)$$

Como se indica en el Teorema 2.1: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_J \geq 0$. Esto implica que los términos de la sumatoria $\sum_{j=1}^J \lambda_j$ tienen menor peso conforme j aumenta. Por lo tanto, los últimos autovalores aportan menos que los primeros en la reconstrucción de σ_T^2 . Dado que los primeros CPs capturan la mayor parte de la σ_T^2 , la dimensionalidad del sistema puede reducirse eliminando las direcciones asociadas a los λ_j más pequeños, sin el perjuicio de una pérdida de información significativa en lo que a σ_T^2 respecta.

Una vez obtenida la matriz de rotación $\bar{\mathbf{P}}$, la matriz de datos \mathbf{X} puede escribirse como:

$$\mathbf{X} = \bar{\mathbf{T}}\bar{\mathbf{P}}^T, \quad (2.23)$$

donde $\bar{\mathbf{T}}$ es la matriz de coordenadas de \mathbf{X} en el espacio de los CPs y se denomina matriz de SCORES. Además se verifica que:

$$\mathbf{R} = \frac{1}{(I-1)} \mathbf{X}^T \mathbf{X} = \bar{\mathbf{P}} \bar{\boldsymbol{\Lambda}} \bar{\mathbf{P}}^T, \quad (2.24)$$

$$\bar{\boldsymbol{\Lambda}} = \frac{1}{(I-1)} \bar{\mathbf{T}}^T \bar{\mathbf{T}} = \text{diag}([\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_J]^T), \quad \forall j=1, 2, \dots, J. \quad (2.25)$$

Si se considera el caso en que el espacio de los CPs se reduce de \mathbb{R}^J a \mathbb{R}^{Rt} , es decir que los últimos $J - Rt$ componentes se eliminan del análisis, las matrices de rotación y de SCORES definidas arriba pueden subdividirse de la siguiente manera:

$$\bar{\mathbf{P}} = [\mathbf{P} \quad \tilde{\mathbf{P}}], \quad (2.26)$$

$$\bar{\mathbf{T}} = [\mathbf{T} \quad \tilde{\mathbf{T}}], \quad (2.27)$$

donde $\bar{\mathbf{P}} \in \mathbb{R}^{J \times J}$ es la matriz de cambio de coordenadas cuando se considera el espacio completo de los CPs, $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{J \times Rt}$ es la matriz del cambio de coordenadas cuando sólo Rt CPs son retenidos y define la transformación lineal $\ell: \mathbb{R}^J \rightarrow \mathbb{R}^{Rt}$, y $\tilde{\mathbf{P}} \in \mathbb{R}^{J \times (J-Rt)}$ es el complemento de \mathbf{P} para dar $\bar{\mathbf{P}}$. Asimismo, $\bar{\mathbf{T}} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ define las coordenadas de \mathbf{X} en el espacio completo de los CPs, $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{I \times Rt}$ representa las coordenadas de \mathbf{X} en el espacio retenido y finalmente $\tilde{\mathbf{T}} \in \mathbb{R}^{I \times (J-Rt)}$ representan las coordenadas de los datos en el espacio excluido.

La ecuación (2.23) puede reescribirse como:

$$\mathbf{X} = \bar{\mathbf{T}} \bar{\mathbf{P}}^T = [\mathbf{T} \quad \tilde{\mathbf{T}}] \begin{bmatrix} \mathbf{P}^T \\ \tilde{\mathbf{P}}^T \end{bmatrix} = \mathbf{T} \mathbf{P}^T + \tilde{\mathbf{T}} \tilde{\mathbf{P}}^T = \mathbf{T} \mathbf{P}^T + \mathbf{E}_r = \hat{\mathbf{X}} + \mathbf{E}_r. \quad (2.28)$$

y teniendo en cuenta que $\mathbf{T} = \mathbf{X} \mathbf{P}$, $\hat{\mathbf{X}}$ y \mathbf{E}_r , resultan:

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{XPP}^T = \mathbf{XC} \quad , \quad (2.29)$$

$$\mathbf{E}_r = \mathbf{XP\tilde{P}}^T = \mathbf{X(I - PP}^T) = \mathbf{X(I - C)} \quad , \quad (2.30)$$

donde $\mathbf{E}_r \in \mathbb{R}^{I \times J}$ es la matriz de residuos, que contiene la parte de \mathbf{X} que no está representada en el espacio reducido de los CPs.

La bondad de la representación del modelo de CPs puede medirse calculando la reconstrucción de la varianza total que se logra considerando solo los primeros Rt CPs. Para ello se evalúa el porcentaje de varianza acumulada cuando el sistema se describe empleando Rt CPs de la siguiente manera:

$$\% \sigma_T^{2,acum} = \sum_{r=1}^{Rt} \lambda_r \times \frac{100}{J} \quad . \quad (2.31)$$

Empleando la subdivisión de las matrices $\bar{\mathbf{P}}$ y $\bar{\mathbf{T}}$, el cálculo del T^2 para un vector de observaciones estandarizadas \mathbf{x} resulta igual a:

$$T^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T (\bar{\mathbf{P}} \bar{\mathbf{\Lambda}} \bar{\mathbf{P}}^T)^{-1} \mathbf{x} = (\mathbf{x}^T \bar{\mathbf{P}}) \bar{\mathbf{\Lambda}}^{-1} (\bar{\mathbf{P}}^T \mathbf{x}) = \bar{\mathbf{t}}^T \bar{\mathbf{\Lambda}}^{-1} \bar{\mathbf{t}} \quad , \quad (2.32)$$

$$T^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{t} \\ \tilde{\mathbf{t}} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{\Lambda}} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{t} \\ \tilde{\mathbf{t}} \end{bmatrix} = \mathbf{t}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{t} + \tilde{\mathbf{t}}^T \tilde{\mathbf{\Lambda}}^{-1} \tilde{\mathbf{t}} = D^2 + T_H^2 \quad , \quad (2.33)$$

donde D^2 es el valor del Estadístico de Hotelling en el Espacio de las VLs Retenidas (\mathbb{R}^{Rt}) para la observación \mathbf{x} , mientras que T_H^2 es el definido en el espacio de las VLs excluidas (\mathbb{R}^{J-Rt}). Este último es conocido como el Estadístico de Hawkins (Jackson, 1991; Qin, 2003) y puede interpretarse como una suma ponderada de los errores de representación (Jackson, 1991). Surgen problemas de mal condicionamiento en el cálculo del T_H^2 porque está

relacionado con los autovalores contenidos en $\tilde{\Lambda}$, algunos de los cuales son muy cercanos a cero. Por tal motivo no se lo utiliza para monitorear el comportamiento del proceso.

En relación con el D^2 , si se asume que $\bar{\mathbf{t}} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \bar{\Lambda})$ (Nomikos y MacGregor, 1994; Kourti y MacGregor, 1995; Nomikos y MacGregor, 1995) entonces la pdf de D^2 resulta igual a:

$$D^2 = \mathbf{t}^T \Lambda^{-1} \mathbf{t} \sim \left(\frac{Rt(I^2 - 1)}{I(I - Rt)} \right) \mathcal{F}_{Rt, I-Rt}, \quad (2.34)$$

donde $\mathcal{F}_{Rt, I-Rt}$ representa la función de distribución \mathcal{F} con Rt e $(I - Rt)$ grados de libertad.

Debido a que hay una parte de información no monitoreada cuando se utiliza solamente el estadístico D^2 , el estudio se complementa con la utilización de un índice que considera los errores asociados a las predicciones, los cuales se miden mediante el Error Cuadrático de Representación (SPE):

$$SPE = \|\mathbf{e}\|^2 = \|(\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{P}^T)\mathbf{x}\|^2. \quad (2.35)$$

A diferencia del T_H^2 , el SPE da la misma importancia a los errores de representación en todas las variables y no sufre los problemas de mal condicionamiento del T_H^2 .

Nomikos y MacGregor (1995) propusieron calcular los valores críticos para el estadístico SPE de manera simple, siguiendo las derivaciones de Box (1954), tal como se muestra en la ecuación (2.36).

$$SPE_C \approx \frac{\text{var}(SPE^{PR})}{2m} \chi_{2m^2/\text{var}(SPE^{PR}), \alpha}^2, \quad (2.36)$$

donde m y $\text{var}(SPE^{\text{PR}})$ son la media y varianza, respectivamente, de los valores de SPE obtenidos para cada uno de los individuos de la PR.

Se han presentado diferentes metodologías para estimar la influencia de cada una de las variables sobre el valor final del D^2 . La más ampliamente utilizada es la propuesta por Westerhuis y col. (2000). Dicha estrategia es aplicable a espacios latentes donde las direcciones no son necesariamente ortonormales y además tiene en cuenta posibles correlaciones entre los CPs. Las CVs al valor del estadístico se evalúan de la siguiente manera:

$$D^2 = \mathbf{t}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{t} = \mathbf{t}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \left[\mathbf{x}^T \mathbf{P}^T (\mathbf{P}^T \mathbf{P})^{-1} \right]^T, \quad (2.37)$$

$$D^2 = \mathbf{t}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \sum_{j=1}^J \left[x_j \mathbf{P}_{(j,:)} (\mathbf{P}^T \mathbf{P})^{-1} \right]^T, \quad (2.38)$$

$$D^2 = \sum_{j=1}^J \mathbf{t}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \left[x_j \mathbf{P}_{(j,:)} (\mathbf{P}^T \mathbf{P})^{-1} \right]^T = \sum_{j=1}^J c_j^{D^2}, \quad (2.39)$$

donde $\mathbf{P}_{(j,:)}$ es la j -ésima fila de \mathbf{P} , $\mathbf{\Lambda}$ es la matriz de covarianza de \mathbf{T} y $c_j^{D^2}$ es la contribución de la j -ésima observación al estadístico D^2 . Dada su definición, $c_j^{D^2}$ puede tomar valores negativos.

Las CVs al estadístico SPE resultan más sencillas de calcular e interpretar que las anteriores, puesto que esta métrica no considera la correlación entre los errores y sólo evalúa la magnitud de los residuos en cada variable.

$$SPE = \|\mathbf{e}\|^2 = \|(\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{P}^T) \mathbf{x}\|^2 = \sum_{j=1}^J e_j^2 = \sum_{j=1}^J c_j^{SPE}. \quad (2.40)$$

donde el subíndice j corresponde a la j -ésima variable.

Westerhuis y col. (2000) propusieron usar límites de control para las CVs, los cuales se calculan a partir de las CVs de los datos considerados en la PR. De esta forma se tiene en cuenta que existen, de manera natural, diferencias considerables en las magnitudes de las CVs al valor del estadístico. La estimación de los límites de control para las CVs al D^2 se hace de la siguiente manera:

$$\tau_j^{D^2} = \overline{c_j^{D^2}} + \kappa \sqrt{\text{var}(c_j^{D^2})}, \quad (2.41)$$

donde $\tau_j^{D^2}$ es el límite de control para las contribuciones de la j -ésima variable, y $\overline{c_j^{D^2}}$ y $\text{var}(c_j^{D^2})$ son el valor promedio y la varianza muestral de las contribuciones de dicha variable en la PR, respectivamente. Estos se calculan de la siguiente manera:

$$\overline{c_j^{D^2}} = \frac{\sum_{i=1}^I c_{j,i}^{D^2}}{I}, \quad (2.42)$$

$$\text{var}(c_j^{D^2}) = \frac{\sum_{i=1}^I (c_{j,i}^{D^2} - \overline{c_j^{D^2}})^2}{I-1}, \quad (2.43)$$

El valor de la constante κ puede ser definido por el usuario de acuerdo a las necesidades del caso. Si las CVs estuvieran normalmente distribuidas, un valor adecuado puede ser $\kappa=3$ (Westerhuis y col., 2000). Por su parte, los límites para las c_j^{SPE} ($j=1\dots J$) se establecen asumiendo que siguen una distribución χ^2 aproximada

$$\tau_j^{SPE} = \frac{\text{var}(c_j^{SPE})}{2\overline{c_j^{SPE}}} \chi^2_{(2(\overline{c_j^{SPE}})^2/\text{var}(c_j^{SPE}), \alpha)}, \quad (2.44)$$

donde $\overline{c_j^{SPE}}$ es el valor medio de las CVs en la PR y $\text{var}(c_j^{SPE})$ es la varianza asociada a las mismas.

Por su parte, Yue y Qin (2001) unificaron los estadísticos utilizados en la estrategia PCA con el fin de monitorear simultáneamente la porción residual y retenida del proceso. Estos autores definieron el Estadístico Combinado (γ) como la suma del D^2 y del SPE normalizados utilizando sus respectivos valores críticos:

$$\gamma(\mathbf{x}) = \frac{SPE(\mathbf{x})}{SPE_c} + \frac{D^2(\mathbf{x})}{D_c^2} = \mathbf{x}\Theta\mathbf{x}^T, \quad (2.45)$$

donde

$$\Theta = \frac{\mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T}{D_c^2} + \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{P}^T)}{SPE_c} \quad (2.46)$$

En los trabajos presentados por Yue y Qin (2001), Qin (2003), Alcala y Qin (2009; 2011), se asume que la distribución de \mathbf{x} es normal multivariada ($\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$) y, en base a los trabajos de Box (1954) para estadísticos de forma cuadrática, se propone una distribución de probabilidad aproximada para los estadísticos D^2 , SPE y γ . De manera general, se considera que $Estadístico \sim g \chi^2(h)$ cuyos parámetros g y h se definen en la Tabla 2.1. En el Apéndice 3 se presenta el desarrollo de las fórmulas de cálculo correspondientes a estos parámetros para los tres estadísticos.

Tabla 2.1: Parámetros de la distribución de probabilidad de D^2 , SPE y γ (PCA)

$Estadístico \sim g^{Estadístico} \chi^2(h^{Estadístico})$			
	D^2	SPE	γ
$g^{Estadístico}$	1	$\frac{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j}$	$\frac{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{SPE_C^2}}{\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{SPE_C}}$
$h^{Estadístico}$	Rt	$\frac{\left[\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j \right]^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2}$	$\frac{\left[\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{SPE_C} \right]^2}{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{SPE_C^2}}$

Con el fin de calcular las CVs a los estadísticos involucrados en el PCA, Alcalá y Qin (2009) extendieron el enfoque propuesto por Dunia y Qin (1998) al monitoreo estadístico de procesos. Estos últimos autores indicaron que la reconstrucción de un estadístico en la dirección de una observación minimiza el efecto de la medición sobre el valor del estadístico, y utilizaron este concepto para identificar sensores defectuosos.

Alcalá y Qin (2009) asumieron que la magnitud de la reconstrucción en la dirección de la variable elegida puede ser considerada como una medida de la CV al estadístico y definieron la Contribución Basada en la Reconstrucción (RBC). Dichos autores consideraron que si se produce la falla del j -ésimo sensor en un sistema formado por J instrumentos, la observación $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^J$ puede reconstruirse mediante el siguiente modelo:

$$\hat{\mathbf{x}}_j = \mathbf{x} - \xi_j f_j, \tag{2.47}$$

donde $\hat{\mathbf{x}}_j$ es el vector observación reconstruido en la j -ésima dirección, el vector ξ_j representa dicha dirección, y f_j es la magnitud de la reconstrucción de la j -ésima variable. El vector ξ_j contiene ceros en todas sus posiciones excepto en la j -ésima, cuyo valor es uno. Además plantearon el siguiente problema de optimización no lineal sin restricciones para calcular el valor de f_j que minimiza un estadístico definido en forma cuadrática

$$\text{Min } \hat{\mathbf{x}}^T \mathbf{M}^{-1} \hat{\mathbf{x}} = (\mathbf{x} - \xi_j f_j)^T \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{x} - \xi_j f_j), \quad (2.48)$$

donde \mathbf{M} es la matriz de peso utilizada en la definición del estadístico. Se establece que la solución del problema de optimización, f_j , elevada al cuadrado es la RBC de la j -ésima variable, esto es:

$$RBC_j^{\text{Estadístico}} = f_j^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{M} \xi_j (\xi_j^T \mathbf{M} \xi_j)^{-1} \xi_j^T \mathbf{M} \mathbf{x}. \quad (2.49)$$

Las matrices que definen las formas cuadráticas del D^2 , SPE y γ se incluyen en la Tabla 2.2.

Tabla 2.2: Matrices que definen la forma cuadrática de D^2 , SPE y γ

	D^2	SPE	γ
\mathbf{M}	$\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{P}^T$	$\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{P}^T$	$\mathbf{\Theta} = \frac{\mathbf{P}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{P}^T}{D_c^2} + \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{P}^T)}{SPE_c}$

Dado que las ecuaciones de definición de las RBCs también son formas cuadráticas, sus límites de control se definen considerando que las mismas siguen una distribución $g_{CV}\chi^2(1)$. Las fórmulas para calcular los valores del parámetro g_{CV} para las CVs al D^2 , SPE y γ se resumen en la Tabla 2.3, y en el Apéndice 3 se derivan sus expresiones.

Tabla 2.3: Parámetros para estimar los límites de control de las RBC

	D^2	SPE	γ
g_{CV}^r	1	$\frac{(\tilde{\mathbf{P}}\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{P}}^T)_{j,j}}{(\tilde{\mathbf{P}}\tilde{\mathbf{P}}^T)_{j,j}}$	$\frac{\frac{(\mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T)_{j,j}}{(D_C^2)^2} + \frac{(\tilde{\mathbf{P}}\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{P}}^T)_{j,j}}{SPE_C^2}}{\frac{(\mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T)_{j,j}}{D_C^2} + \frac{(\mathbf{I}-\mathbf{P}\mathbf{P}^T)_{j,j}}{SPE_C}}$

Recientemente, Godoy y col. (2013) propusieron una estrategia simple para descomponer un estadístico, definido en forma cuadrática y normalizado empleando su valor crítico, en una sumatoria de J términos. Estos representan las CVs a dicho estadístico y se evalúan de la siguiente manera:

$$Estadístico = \mathbf{x}^T \mathbf{M} \sum_{j=1}^J \tilde{\mathbf{x}}_j = \sum_{j=1}^J \mathbf{x}^T \mathbf{M}_j x_j = \sum_{j=1}^J c_j^{Estadístico}, \quad (2.50)$$

donde $\tilde{\mathbf{x}}_j$ es un vector columna con un único valor distinto de cero en la posición j -ésima y \mathbf{M}_j es la columna j -ésima de la matriz que define al estadístico. Dado que en condiciones de operación normales, el estadístico normalizado no supera el valor 1, se asume que las CVs que exceden dicho valor corresponden a las mediciones que señalan la falla.

2.3.2 Implementación de la Estrategia de Monitoreo PCA

2.3.2.1 Etapa I

La PR representada por la matriz $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{I \times J}$ se emplea para la generación del modelo del proceso en el espacio de las variables latentes. Inicialmente se obtienen las matrices $\bar{\mathbf{P}}, \bar{\mathbf{T}}$ y $\bar{\Lambda}$ y, luego se determina el número de CPs a retener (Rt) con el objetivo de reducir el espacio

de variables (Valle y col., 1999). Posteriormente se define el modelo reducido del proceso representado por las matrices \mathbf{P} , \mathbf{T} y \mathbf{E}_r , según lo explicado en la sección 2.3.1 y se las almacena.

Si se implementa la estrategia de PCA propuesta por Nomikos y MacGregor (1995), luego de formular el modelo empírico se calculan los valores críticos para el D^2 y SPE considerando las funciones de densidad de probabilidad indicadas por las Ecs. (2.34) y (2.36), respectivamente, y se evalúan los límites de control de las CVs a dichos estadísticos empleando las Ecs. (2.41) y (2.44).

En cambio, si se adoptan las variaciones sugeridas por Alcalá y Qin (2009), después de obtener las matrices del modelo del proceso se evalúan los valores críticos para los estadísticos D^2 , SPE y γ , considerando que siguen una distribución $g\chi^2(h)$, cuyos parámetros g y h son los definidos en la Tabla 2.1. Posteriormente se calculan los límites de control de las CVs asumiendo que se distribuyen según una función de densidad de probabilidad $g_{CV}\chi^2(1)$. Los parámetros g_{CV} se presentan en la Tabla 2.3.

2.3.2.2 Etapa II

La Etapa II es la fase de monitoreo en línea del proceso. Cada nueva observación \mathbf{z} se centra y estandariza utilizando los vectores $\bar{\mathbf{z}}$ y $\boldsymbol{\sigma}_z$, respectivamente. Luego se calculan las coordenadas de la medición estandarizada, \mathbf{x} , en el espacio de los CPs retenidos (\mathbf{t}), y el error de representación (\mathbf{e}):

$$\mathbf{t} = \mathbf{P}^T \mathbf{x}, \tag{2.51}$$

$$\mathbf{e} = \tilde{\mathbf{P}} \tilde{\mathbf{P}}^T \mathbf{x} = (\mathbf{I} - \mathbf{P} \mathbf{P}^T) \mathbf{x}. \tag{2.52}$$

Estas cantidades se emplean para el cálculo de los estadísticos usados para testear la hipótesis de que el proceso se encuentra operando en condiciones normales.

Si se emplea la metodología de monitoreo tradicional, se calculan el D^2 y el SPE . Si alguno de ellos resulta ser superior a su correspondiente valor crítico durante tres observaciones consecutivas, se declara que el proceso está fuera de control. Una vez detectado el estado anormal se hace necesario identificar cuál o cuáles son las variables medidas que indicaron tal condición. Estas son las que verifican alguna de las siguientes desigualdades o ambas: $c_j^{D^2} > \tau_j^{D^2}$, $c_j^{SPE} > \tau_j^{SPE}$

Si se emplea el γ durante la fase de detección y éste supera a su valor crítico (γ_C) durante tres intervalos de muestreo, las RBCs se evalúan mediante la Ec. 2.49, y se las compara con sus respectivos límites de control (τ_j^γ) para determinar el conjunto de variables sospechosas. De manera similar, si se utiliza la definición de CV propuesta por Godoy y col. (2013), se asume que las variables cuyas contribuciones al D^2 o SPE normalizados superan el valor 1 son las que indican la existencia de la falla.

2.3.3 Análisis de Componentes Principales Kernel

La estrategia del KPCA (Schölkopf, 1998) comprende dos pasos: 1) el mapeo de las mediciones, mediante una función no lineal, desde el espacio de las VOs a un espacio de mayor dimensión conocido como espacio de las características, 2) la implementación del PCA descrito en la sección anterior considerando los datos transformados, ya que se espera que las relaciones entre ellos sean más lineales que las existentes entre las VOs. La metodología KPCA tiene la ventaja de no requerir el mapeo explícito de las VOs en el espacio de las características, ni tampoco el cálculo explícito del producto escalar entre los vectores mapeados.

Con el objetivo de realizar el modelo del KPCA, se utilizan los datos del proceso obtenidos en condiciones operativas normales, dispuestos en la matriz $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{I \times J}$. Cada vector de medición $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{J \times 1}$ puede mapearse en el espacio de las características, de manera tal que $\boldsymbol{\varphi} = \Phi(\mathbf{x})$, siendo $\Phi: \mathbb{R}^J \rightarrow H$ un mapeo no lineal a un espacio de Hilbert (H). Una propiedad importante del espacio de las características es que el producto escalar de dos vectores $\boldsymbol{\varphi}_i$ y $\boldsymbol{\varphi}_j$ puede calcularse en función de los vectores originales \mathbf{x}_i y \mathbf{x}_j de la siguiente manera:

$$\boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_j^T = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), \quad (2.53)$$

siendo $k(\cdot)$ la función kernel, de la cual se conocen diversas variantes (kernel gaussiano, polinómico, radial, etc.).

Si se asume que los vectores mapeados están centrados y dispuestos en una matriz $\boldsymbol{\beta} = [\boldsymbol{\varphi}_1^T, \dots, \boldsymbol{\varphi}_I^T]$, tal que la matriz de covarianza muestral de $\boldsymbol{\beta}$ es S^φ , entonces se verifica que:

$$\mathbf{S}^\varphi = \frac{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}}{(I-1)} = \frac{\sum_{i=1}^I \boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_i^T}{(I-1)}. \quad (2.54)$$

Como se explicó en la Sección 2.3.1, el PCA se basa en calcular los autovalores y autovectores de la matriz \mathbf{S}^φ , de manera tal que

$$\mathbf{S}^\varphi = \bar{\mathbf{P}}^\varphi \bar{\boldsymbol{\Lambda}}^\varphi (\mathbf{P}^\varphi)^T \quad (2.55)$$

donde $\bar{\mathbf{P}}^\varphi$ y $\bar{\boldsymbol{\Lambda}}^\varphi$ representan la matriz de cambio de coordenadas y de los autovalores de la matriz \mathbf{S}^φ , respectivamente.

Qin y Alcalá (2010) propusieron enfocarse inicialmente en la resolución del siguiente problema de autovectores y autovalores:

$$\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta} \mathbf{v} = \sum_{i=1}^I \boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_i^T \mathbf{v} = \lambda^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}} \mathbf{v}. \quad (2.56)$$

donde $\lambda^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}}$ y \mathbf{v} son los correspondientes autovalores y autovectores de la matriz $\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}$. Dado que los vectores $\boldsymbol{\varphi}$ no se encuentran definidos explícitamente, ni tampoco el producto $\boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_i^T$, se aplica el truco del Kernel para resolver el problema anterior. Para simplificar la notación $\lambda^{\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}}$ se denota de aquí en adelante como λ . Se siguen los siguientes pasos: la Ec. (2.56) se pre-multiplica por $\boldsymbol{\beta}$

$$\boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta} \mathbf{v} = \lambda \boldsymbol{\beta} \mathbf{v}, \quad (2.57)$$

se define la matriz Gran Kernel, \mathbf{K} ,

$$\mathbf{K} = \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\beta}^T = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varphi}_1^T \boldsymbol{\varphi}_1 & \cdots & \boldsymbol{\varphi}_1^T \boldsymbol{\varphi}_I \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{\varphi}_I^T \boldsymbol{\varphi}_1 & \cdots & \boldsymbol{\varphi}_I^T \boldsymbol{\varphi}_I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & \cdots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_I) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(\mathbf{x}_I, \mathbf{x}_1) & \cdots & k(\mathbf{x}_I, \mathbf{x}_I) \end{bmatrix}, \quad (2.58)$$

y se realiza la asignación:

$$\boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\beta} \mathbf{v}, \quad (2.59)$$

lo que permite reescribir la Ec. (2.57) de la siguiente forma:

$$\mathbf{K} \boldsymbol{\zeta} = \lambda \boldsymbol{\zeta}. \quad (2.60)$$

La Ec. (2.60) muestra que $\boldsymbol{\zeta}$ y λ representan los autovectores y autovalores, respectivamente, de la matriz \mathbf{K} .

Con el objetivo de determinar los autovectores \mathbf{v} , la ecuación (2.59) se pre-multiplica por $\boldsymbol{\beta}^T$ y utilizando la Ec. (2.56) surge que:

$$\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta} \mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}, \quad (2.61)$$

en base a lo que se demuestra que:

$$\mathbf{v} = \lambda^{-1} \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\zeta}. \quad (2.62)$$

Para obtener el modelo empírico del proceso en el espacio de las características, primero se obtienen los autovalores λ_j y los autovectores $\boldsymbol{\zeta}_j$, según indica la Ec. (2.60). Los autovalores de la matriz \mathbf{K} son iguales a los de la matriz $\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}$, y sus autovectores se emplean para calcular los autovectores de $\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}$.

En base a las Ecs. (2.59) y (2.61), se calcula la norma de $\boldsymbol{\zeta}_j$

$$\boldsymbol{\zeta}_j^T \boldsymbol{\zeta}_j = \mathbf{v}_j^T \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta} \mathbf{v}_j = \mathbf{v}_j^T \lambda_j \mathbf{v}_j = \lambda_j, \quad (2.63)$$

y se determina que ésta debe ser igual a $\sqrt{\lambda_j}$ con el fin de cumplir las condiciones de ortonormalidad de \mathbf{v}_j ($\mathbf{v}_j^T \mathbf{v}_j = 1$). Por lo tanto, si $\boldsymbol{\zeta}_j^\circ$ es el autovector unitario correspondiente al autovalor λ_j obtenido al hacer la descomposición en autovalores y autovectores de la matriz \mathbf{K} , entonces:

$$\boldsymbol{\zeta}_j = \sqrt{\lambda_j} \boldsymbol{\zeta}_j^\circ. \quad (2.64)$$

Se seleccionan Rt autovectores para formar la matriz de cambio de coordenadas en el espacio de los CPs retenidos, $\mathbf{P}^\phi = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \dots \ \mathbf{v}_{Rt}]$. Teniendo en cuenta la Ec. (2.62), \mathbf{P}^ϕ resulta igual a:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^\phi &= \left[\frac{1}{\lambda_1} \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\zeta}_1 \quad \dots \quad \frac{1}{\lambda_{Rt}} \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\zeta}_{Rt} \right], \\ &= \left[\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\zeta}_1^\circ \lambda_1^{-1/2} \quad \dots \quad \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\zeta}_{Rt}^\circ \lambda_{Rt}^{-1/2} \right], \\ &= \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{P}^{\mathbf{K}} (\boldsymbol{\Lambda}^{\mathbf{K}})^{-1/2}, \end{aligned} \quad (2.65)$$

donde $\mathbf{P}^{\mathbf{K}} = [\boldsymbol{\zeta}_1^{\circ} \boldsymbol{\zeta}_2^{\circ} \dots \boldsymbol{\zeta}_{R_t}^{\circ}]$ y $\boldsymbol{\Lambda}^{\mathbf{K}} = \text{diagonal}\{\lambda_1^{\mathbf{K}} \lambda_2^{\mathbf{K}} \dots \lambda_{R_t}^{\mathbf{K}}\}$ son los autovectores y autovalores asociados a los CPs retenidos de la matriz \mathbf{K} . Estos últimos se encuentran ubicados en orden descendiente de magnitud.

Se debe recordar que la matriz $\boldsymbol{\Lambda}^{\mathbf{K}}$ representa los autovalores de la matriz \mathbf{K} , los cuales son los mismos que los de la matriz $\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}$, por lo tanto los autovalores del modelo PCA de \mathbf{S}^{ϕ} se expresan de la siguiente manera:

$$\boldsymbol{\Lambda}^{\phi} = \frac{\boldsymbol{\Lambda}^{\mathbf{K}}}{(I-1)} \quad (2.66)$$

Dada una medición \mathbf{x} , los SCORES representan las proyecciones de $\boldsymbol{\phi}$ en el espacio de los CPs retenidos, y se las calcula de la siguiente manera:

$$\mathbf{t} = (\boldsymbol{\Lambda}^{\mathbf{K}})^{-1/2} (\mathbf{P}^{\mathbf{K}})^T \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\phi} = (\boldsymbol{\Lambda}^{\mathbf{K}})^{-1/2} (\mathbf{P}^{\mathbf{K}})^T \mathbf{k}(\mathbf{x}), \quad (2.67)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{k}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\phi} &= [\boldsymbol{\phi}_1^T \boldsymbol{\phi} \quad \boldsymbol{\phi}_2^T \boldsymbol{\phi} \quad \dots \quad \boldsymbol{\phi}_I^T \boldsymbol{\phi}]^T, \\ &= [k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}) \quad k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}) \quad \dots \quad k(\mathbf{x}_I, \mathbf{x})]^T. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Con respecto a los índices de monitoreo necesarios para realizar la detección de eventos anómalos, la estrategia KPCA emplea los mismos estadísticos que su contraparte lineal. El D^2 se define de la siguiente manera:

$$D^2 = \mathbf{t}^T (\boldsymbol{\Lambda}^{\phi})^{-1} \mathbf{t} \quad (2.69)$$

y empleando la Ec. (2.67) se obtiene su expresión en función de los vectores kernel:

$$D^2 = (I-1) \mathbf{k}(\mathbf{x})^T \mathbf{P}^{\mathbf{K}} (\boldsymbol{\Lambda}^{\mathbf{K}})^{-2} (\mathbf{P}^{\mathbf{K}})^T \mathbf{k}(\mathbf{x}). \quad (2.70)$$

El *SPE* se define en función de los SCORES en el espacio de los CPs excluidos. Estos se evalúan de la siguiente manera:

$$\tilde{\mathbf{t}} = \left(\mathbf{P}^\phi\right)^T \boldsymbol{\phi} = \left[\mathbf{v}_{Rt+1} \mathbf{v}_{Rt+2} \dots \mathbf{v}_I\right]^T \boldsymbol{\phi}. \quad (2.71)$$

Por lo tanto el *SPE* se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$SPE = \tilde{\mathbf{t}}^T \tilde{\mathbf{t}} = \boldsymbol{\phi}^T \mathbf{P}^\phi \left(\mathbf{P}^\phi\right)^T \boldsymbol{\phi}. \quad (2.72)$$

Si se considera que $\mathbf{P}^\phi \left(\mathbf{P}^\phi\right)^T = \mathbf{I} - \mathbf{P}^\phi \left(\mathbf{P}^\phi\right)^T$ se obtiene luego que

$$SPE = k(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - \mathbf{k}(\mathbf{x})^T \mathbf{P}^\phi \left(\boldsymbol{\Lambda}^K\right)^{-1} \left(\mathbf{P}^\phi\right)^T \mathbf{k}(\mathbf{x}). \quad (2.73)$$

Alcala y col. (2010) también extendieron el uso del γ al monitoreo de procesos empleando la técnica KPCA. En base a los trabajos de Box (1954) para estadísticos de forma cuadrática, propusieron una distribución de probabilidad aproximada para los estadísticos D^2 , *SPE* y γ cuando se aplica la metodología KPCA. De manera general, se considera que *Estadístico* $\sim g \chi^2(h)$ cuyos parámetros g y h se presentan en la Tabla 2.4.

Tabla 2.4: Parámetros de la distribución de probabilidad de D^2 , *SPE* y γ (KPCA)

<i>Estadístico</i> $\sim g^{\text{Estadístico}} \chi\left(h^{\text{Estadístico}}\right)$			
	D^2	<i>SPE</i>	γ
$g^{\text{Estadístico}}$	1	$\frac{1}{(I-1)} \frac{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j}$	$\frac{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{(I-1)^2 SPE_C^2}}{\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{(I-1) SPE_C}}$
$h^{\text{Estadístico}}$	Rt	$\frac{\left[\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j\right]^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2}$	$\frac{\left[\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{(I-1) SPE_C}\right]^2}{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{(I-1)^2 SPE_C^2}}$

En los trabajos presentados por Godoy y col. (2013; 2014), los valores críticos de los estadísticos se obtienen mediante la estrategia KDE, evitando así suposiciones sobre la pdf de las observaciones.

El desarrollo previo de la metodología KPCA considera vectores $\boldsymbol{\varphi}$ centrados. En los casos en que esto no pueda comprobarse, se aplica la técnica descrita a continuación. Los vectores $\boldsymbol{\varphi}$ centrados empleando la media muestral se representan de la siguiente manera:

$$\bar{\boldsymbol{\varphi}} = \boldsymbol{\varphi} - \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I \boldsymbol{\varphi}_i = \boldsymbol{\varphi} - [\boldsymbol{\varphi}_1 \cdots \boldsymbol{\varphi}_I] \mathbf{1}_I, \quad (2.74)$$

donde $\mathbf{1}_I$ es un vector I -dimensional cuyos elementos son iguales a $1/I$ y la función kernel de dos vectores centrados resulta entonces igual a

$$\bar{k}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \bar{\boldsymbol{\varphi}}_i^T \bar{\boldsymbol{\varphi}}_j = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \mathbf{k}(\mathbf{x}_i)^T \mathbf{1}_I + \mathbf{1}_I^T \mathbf{K} \mathbf{1}_I \quad (2.75)$$

De forma similar, el vector kernel escalado se calcula mediante la siguiente expresión:

$$\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{x}_i) = \begin{bmatrix} \bar{\boldsymbol{\varphi}}_1 & \bar{\boldsymbol{\varphi}}_2 & \cdots & \bar{\boldsymbol{\varphi}}_I \end{bmatrix}^T \bar{\boldsymbol{\varphi}}_i = \mathbf{F} [\mathbf{k}(\mathbf{x}_i) - \mathbf{K} \mathbf{1}_I] \quad (2.76)$$

siendo

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} - \mathbf{E} \quad (2.77)$$

En la ecuación anterior \mathbf{I} representa la matriz identidad de dimensiones $(I \times I)$, y \mathbf{E} es una matriz de las mismas dimensiones cuyos elementos son iguales a $1/I$. Por su parte, la matriz gran kernel centrada se evalúa como sigue:

$$\bar{\mathbf{K}} = \begin{bmatrix} \bar{\boldsymbol{\varphi}}_1 & \bar{\boldsymbol{\varphi}}_2 & \cdots & \bar{\boldsymbol{\varphi}}_I \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \bar{\boldsymbol{\varphi}}_1 & \bar{\boldsymbol{\varphi}}_2 & \cdots & \bar{\boldsymbol{\varphi}}_I \end{bmatrix} = \mathbf{F} \mathbf{K} \mathbf{F} \quad (2.78)$$

Se puede apreciar que el escalado de los vectores \mathbf{k} es una tarea sencilla de realizar en función de los valores de las VOs.

En relación con la identificación de las variables que revelan la falla, Alcalá y col (2010) extendieron el empleo de las RBC a la metodología KPCA. Al igual que para el PCA

tradicional, propusieron calcular la magnitud f_j de un vector con dirección ξ_j tal que se minimice el estadístico de la medición reconstruida. Es decir,

$$f_j = \arg \min \text{ Estadístico}(\mathbf{k}(\mathbf{x} - \xi_j f_j)). \quad (2.79)$$

El valor de la RBC para la dirección ξ_j es f_j^2 . La resolución del problema de optimización se realiza igualando a cero la derivada primera de la función objetivo con respecto a f_j y calculando la variable a partir de esa ecuación. Dado que f_j no puede obtenerse de manera explícita, es necesario aplicar un procedimiento iterativo para calcularla. Las RBCs para el KPCA no siguen una distribución de probabilidad conocida, por lo que los autores propusieron realizar una inspección visual de las mismas con el fin de determinar las variables sospechosas. Es decir no se ha reportado una técnica de identificación basada en las RBCs para el KPCA que permita una inspección automática de las observaciones.

Por su parte, Godoy y col (2014) propusieron calcular las CVs a un conjunto de estadísticos definidos para la estrategia Cuadrados Mínimos Parciales Kernel. Los estadísticos se normalizan empleando sus valores críticos. De manera general, la contribución de la j -ésima variable a un dado Estadístico Normalizados, $c_j^{\text{Estadístico-N}}$, se evalúa en función de la derivada primera del mismo con respecto a dicha variable, para valores constantes de las restantes observaciones, tal como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\text{Estadístico}_{-N} \approx \sum_{j=1}^J \left(\frac{x_j}{2} \frac{\partial \text{Estadístico}_{-N}}{\partial x_j} \right) = \sum_{j=1}^J c_j^{\text{Estadístico}_{-N}}, \quad (2.80)$$

Una variable se considera sospechosa si la $c^{\text{Estadístico-N}}$ supera el valor 1.

2.3.4 Implementación de la Estrategia de Monitoreo KPCA

2.3.4.1 Etapa I

A partir de datos históricos del proceso se seleccionan I muestras de J observaciones que constituyen la PR. Esta se representa mediante una matriz $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{I \times J}$. Luego se calcula $\bar{\mathbf{z}}$ y $\sigma_{\mathbf{z}}$, con los cuales se estandariza \mathbf{Z} . Los datos de la PR centrados y escalados forman la matriz \mathbf{X} . Posteriormente se calcula un vector kernel para cada observación de la PR empleando la función kernel seleccionada, y se lo almacena en la matriz \mathbf{K} .

La matriz \mathbf{K} se centra según indica la Ec.(2.78), y se realiza su descomposición en autovalores y autovectores. Luego de determinar Rt , se definen las submatrices $\mathbf{P}^{\mathbf{K}}$ y $\mathbf{\Lambda}^{\mathbf{K}}$, y se las almacena. Si el monitoreo se realiza siguiendo el procedimiento sugerido por Alcalá y Qin (2010), después de obtener las matrices del modelo del proceso, se evalúan los valores críticos para los estadísticos D^2 , SPE y γ considerando que siguen una distribución $g\chi^2(h)$, cuyos parámetros g y h se muestran en la Tabla 2.4. Si bien Godoy y col. (2014) utilizan los mismos estadísticos en la fase de detección, sus valores críticos se evalúan mediante la estrategia KDE.

2.3.4.2 Etapa II

Durante la Etapa II, cada nueva observación \mathbf{z} se centra y estandarizada utilizando los vectores $\bar{\mathbf{z}}$ y $\sigma_{\mathbf{z}}$, respectivamente. Se calcula el vector kernel de la observación y se lo centra tal como indica la Ec. (2.76). Luego se calculan los estadísticos empleando el modelo generado en Etapa I. Si el γ se encuentra por encima de su valor crítico durante 3 instantes de tiempos consecutivamente, entonces se detecta la existencia de un comportamiento anormal del sistema y se procede a la identificación de las variables que revelan esta situación. Si se aplica la estrategia de Alcalá y Qin (2010), se calculan las RBCs al estadístico γ mediante un

procedimiento iterativo y se las inspecciona visualmente para determinar cuáles son las variables sospechosas. En cambio, si se aplica la metodología de Godoy y col. (2014), se calculan las CVs a los estadísticos normalizados cuya suma define el γ normalizado, y aquellas contribuciones superiores a 1 se adjudican a las mediciones que revelan el evento anormal.

2.4 Conclusiones

En este capítulo se presentaron de manera concisa las técnicas de monitoreo estadístico que se emplean como punto de partida para el desarrollo de numerosas estrategias que abordan el monitoreo de procesos en diferentes condiciones operativas.

Se evidencia que se han realizado avances significativos en el tema de detección de fallas. No ocurre lo mismo para la identificación de las mediciones que señalan el estado anormal. Todas las metodologías existentes para tal fin evalúan la contribución de una variable al estadístico cuando este supera el valor crítico asumiendo valores constantes e iguales a los observados para las restantes variables. Es decir, se considera que existe una sola curva paramétrica para todos los posibles valores del estadístico en función de la variable analizada.

Por otra parte, se han realizado diferentes suposiciones para determinar los límites de control de las CVs. Las metodologías propuestas por Westerhuis y col. (2000), Alvarez y col. (2007) y Alcalá y Qin (2009) asumen una determinada distribución de probabilidad para las CVs. Los valores límites deben tomarse sólo como orientativos, puesto que puede ocurrir que las suposiciones relacionadas a sus distribuciones no sean adecuadas. En relación con el KPCA, Alcalá y Qin (2010) propusieron determinar el conjunto de variables sospechosas mediante inspección visual de los gráficos de contribución, lo que no permite una identificación automática. Esto se debe a que no fue posible estimar la pdf de las RBCs para el KPCA. Por su parte Godoy y col. (2014) establecen un valor fijo en 1 para las CVs a los

estadísticos normalizados. En general se observa que no existen análisis sistemáticos de desempeño de los procedimientos de identificación propuestos.

Lo anteriormente expuesto indica que la academia aún no ha resuelto el tema de identificación de variables sospechosas cuando el sistema se monitorea aplicando procedimientos de MSPC. Además se evidencia que cuanto más aumenta la complejidad del estadístico empleado en la fase de detección, mayores son las dificultades durante la etapa de identificación.

Estas conclusiones motivan la realización de tareas de investigación que aborden la problemática de la identificación de variables cuando se emplean procedimientos de MSPC, con especial énfasis en el desarrollo de técnicas sencillas, que puedan ser fácilmente trasladadas al ámbito industrial.

2.5 Referencias

- (1) Alcalá, C.; Qin, S. J. Reconstruction-Based Contribution for Process Monitoring. *Automatica*, **2009**, *45*, 1593-1600.
- (2) Alcalá, C.; Qin, S. J. Analysis and Generalization of Fault Diagnosis Methods for Process Monitoring. ”. *J. Process Control*. **2011**, *21*, 322-330
- (3) Alcalá, C.; Qin, J. Reconstruction-Based Contribution for Process Monitoring with Kernel Principal Component Analysis”. *American Control Conference*. **2010**, 7022-7027
- (4) Alvarez, C. R.; Brandolin, A.; Sánchez, M. C. On the Variable Contributions to the D-Statistic. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2007**, *88* (2), 189-196.
- (5) Alvarez, R. Monitoreo estadístico de procesos batch. Aplicaciones a reactores de polimerización. Tesis Doctoral, Universidad Nacional del Sur, 2009.
- (6) Anderson, T. W. *An Introduction to Multivariate Statistical Analysis*. Wiley Publications in Statistics, John Wiley & Sons: New York, 1958.
- (7) Bickel, P. J.; Levina, E. Regularized Estimation of Large Covariance Matrix . *Ann. Stat.* **2008**, *38*, 199-227.
- (8) Box, G. E. P. Some Theorems on Quadratic Forms Applied in the Study of Analysis of Variance Problems, I. Effect of Inequality of Variance in the One-Way Classification". *Ann. Math. Stat.* **1954**, *25* (2), 290-302.
- (9) Dunia, R.; Qin, J. Subspace approach to multidimensional fault identification and reconstruction. *AIChE J.* **1998**, *44*, 1813-1831.
- (10) Godoy, J.; Zumoffen, D.; Vega, J.; Marchetti, J. New Contributions to Non-Linear Process Monitoring through Kernel Partial Least Squares. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2014**, *135*, 76-89.

- (11) Godoy, J.; Zumoffen, D.; Vega, J.; Marchetti, J. A Fault Detection and Diagnosis Technique for Multivariate Processes Using a PLS-Decomposition of the Measurement Space. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2013**, *128*, 25-36.
- (12) Hotelling, H. The Generalization of Student's Ratio. *Ann. Math. Stat.* **1931**, *2* (3), 360-378.
- (13) Jackson, J. E. *A User's Guide to Principal Components*. Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics: New York, 1991.
- (14) Kourti, T.; MacGregor, J. F. Process Analysis, Monitoring and Diagnosis, Using Multivariate Projection Methods. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1995**, *28* (1), 3-21.
- (15) Mason, R. L.; Tracy, N. D.; Young, J. C. Decomposition of T^2 for Multivariate Control Chart Interpretation. *J. Qual. Technol.* **1995**, *27* (2), 99-108.
- (16) Mason, R. L.; Tracy, N. D.; Young, J. C. A Practical Approach for Interpreting Multivariate T^2 Control Chart Signals. *J. Qual. Technol.* **1997**, *29* (4), 396-406.
- (17) Mason, R. L.; Young, J. C. *Multivariate Statistical Process Control with Industrial Applications*. ASA-SIAM Series on Statistics and Applied Probability: Philadelphia, Pennsylvania, 2002
- (18) Jackson, J. E. *A User's Guide to Principal Components*. Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics: New York, 1991.
- (19) Nomikos, P.; MacGregor, J. F. Monitoring of Batch Process Using Multiway Principal Component Analysis. *AIChE J.* **1994**, *40* (8), 1361-1375.
- (20) Nomikos, P.; MacGregor, J. F. Multivariate SPC Charts for Monitoring Batch Processes. *Technometrics.* **1995**, *37* (1), 41-59.
- (21) Qin, S. J. Statistical Process Monitoring: Basics and Beyond. *J. Chemom.* **2003**, *17* (8-9), 480-502.

- (22) Schölkopf, B.; Smola, A.; Muller, K.R. Nonlinear Component Analysis as a Kernel Eigenvalue Problem. *Neural Comput.* **1998**, *10*, 1299-1319.
- (23) Valle, S.; Weihua, L.; Qin, S.J. Selection of the Number of Principal Components: The Variance of the Reconstruction Error Criterion with a Comparison to Other Methods. *Ind. Eng. Chem. Res.* **1999**, *38* (11), 4389–4401.
- (24) Westerhuis, J. A.; Gurden, S. P.; Smilde, A. K. Generalized Contribution Plots in Multivariate Statistical Process Monitoring. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2000**, *51* (1), 95-114.
- (25) Yue, H. H.; Qin, J. S. Reconstruction Based Fault Identification Using a Combined Index. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2001**, *40* (20), 4403–4414.

Capítulo 3

3	<i>Estrategia de Identificación basada en el Vecino en Control más Cercano: Procesos continuos</i>	73
3.1	Introducción	73
3.2	Nueva estrategia para estimar las contribuciones de las variables al estadístico T^2	73
3.3	Implementación de la Estrategia de Monitoreo	80
3.3.1	Etapa I	80
3.3.2	Etapa II	81
3.4	Casos de Estudio	81
3.4.1	Caso de Estudio I	82
3.4.2	Caso de Estudio II	89
3.5	Conclusiones	94
3.6	Referencias	96

Página en Blanco

3 Estrategia de Identificación basada en el Vecino en Control más Cercano: Procesos continuos

3.1 Introducción

En esta tesis se propone un nuevo enfoque para la identificación del conjunto de mediciones a través de las cuales se manifiesta el evento anormal, basado en el concepto del Vecino En Control Más Cercano (NICN, Nearest in Control Neighbor). También se plantea una nueva forma de estimar la Contribución de la Variable (CV) al valor del estadístico usado en la fase de detección.

Siguiendo los lineamientos del nuevo enfoque de identificación, en este capítulo se presenta el desarrollo de una estrategia de Control Estadístico Multivariable de Procesos (MSPC), que aborda el monitoreo de la operación de procesos continuos en el espacio de las Variables Originales (VOs). En consecuencia, la detección de eventos anormales se realiza empleando el Estadístico de Hotelling (T^2).

Inicialmente se define el concepto del NICN y luego se formula la CV al T^2 . A continuación se proponen los límites de control para las CVs, y se reportan los resultados de ejemplos de aplicación sencillos.

3.2 Nueva estrategia para estimar las contribuciones de las variables al estadístico T^2

Tal como se indicó en el capítulo anterior, todas las estrategias existentes para estimar la CV a un estadístico consideran que las restantes tienen valores fijos e iguales a sus observaciones. Por lo tanto, existe una sola curva paramétrica que define todos los posibles valores del estadístico como una función única de la variable analizada, tal como fue señalado por Alvarez y col. (2007). Además varias metodologías asumen que las mediciones

o sus contribuciones siguen una distribución normal multivariada para estimar los límites de control de las CVs.

En esta sección se propone un enfoque alternativo para calcular la CV al estadístico empleado en la etapa de detección, que no asume valores fijos para las restantes mediciones. Dado que, en particular, el propósito es desarrollar una estrategia que aborde el monitoreo de procesos en el espacio de las VOs, el estadístico considerado es el T^2 .

Consideremos la operación de un proceso continuo en el tiempo. Sea $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^J$ el vector de mediciones estandarizadas obtenido en un cierto tiempo t , tal que el valor calculado del T^2 resulta igual a:

$$T^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x}, \quad (3.1)$$

siendo $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{J \times J}$ la matriz de correlación de los datos contenidos en la Población de Referencia (PR). Con el fin de determinar si la operación del proceso es normal, se realiza un test de hipótesis estadístico (Apéndice 1) en el cual se compara el valor del T^2 con su límite crítico, T_c^2 . A fin de evitar suposiciones relacionadas con la distribución de probabilidad de \mathbf{x} , Alvarez y col. (2007) evaluaron el T_c^2 mediante la técnica Kernel Density Estimation (KDE) explicada en el Apéndice 2. Si se verifica que $T^2 > T_c^2$, entonces se detecta la presencia de un evento anormal en el proceso y es necesario identificar el conjunto de variables sospechosas.

En esta tesis se propone iniciar la tarea de identificación calculando las coordenadas del NICN, $\mathbf{x}_{NICN} \in \mathbb{R}^J$ (Cedeño y col., 2012). Este representa la observación, que se encuentra a la menor distancia de \mathbf{x} , para la cual se verifica que el proceso está en control estadístico. Esta

información da una idea de cuan alejado está el proceso del estado normal, y de cuáles son las direcciones (observaciones) que mejor explican la ocurrencia de la situación anómala.

Para determinar las coordenadas del \mathbf{x}_{NICN} se minimiza una medida de la distancia entre los vectores \mathbf{x} y \mathbf{x}_{NICN} , a la vez que se satisface la condición de operación normal del proceso para el \mathbf{x}_{NICN} . Esta es: el valor del T^2 para el NICN es igual al T_c^2 para un dado nivel de significado α del test de hipótesis. El problema de optimización se formula de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \text{Min} \quad & (\mathbf{x}_{NICN} - \mathbf{x})^T \Psi^{-1} (\mathbf{x}_{NICN} - \mathbf{x}) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x}_{NICN}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x}_{NICN} = T_c^2, \end{aligned} \tag{3.2}$$

siendo Ψ la matriz que define el tipo de distancia elegida para medir la proximidad entre \mathbf{x} y \mathbf{x}_{NICN} .

Si las variables se miden en las mismas unidades, no están correlacionadas y sus varianzas son aproximadamente iguales, resulta apropiado usar vectores de medición no estandarizados y utilizar la inversa de la matriz de covarianza para evaluar el estadístico, en tal caso se selecciona $\Psi=\mathbf{I}$. Cuando las diferentes observaciones no son commensurables y pueden tener varianzas muy diferentes, el uso de la distancia Euclídea es inadecuado. En este caso, se propone emplear la matriz de correlación muestral como matriz de pesos, es decir, se selecciona $\Psi=\mathbf{R}$. Esta es una matriz diagonal sólo si las mediciones no son correlacionadas.

A fin de resolver el problema de optimización definido mediante la Ec. (3.2), se expresa la función de Lagrange, L , de la siguiente manera:

$$L = (\mathbf{x}_{NICN} - \mathbf{x})^T \Psi^{-1} (\mathbf{x}_{NICN} - \mathbf{x}) - \theta (\mathbf{x}_{NICN}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x}_{NICN} - T_c^2), \tag{3.3}$$

$$L = \mathbf{x}_{NICN}^T \Psi^{-1} \mathbf{x}_{NICN} + \mathbf{x}^T \Psi^{-1} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T \Psi^{-1} \mathbf{x}_{NICN} - \theta (\mathbf{x}_{NICN}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x}_{NICN} - T_C^2). \quad (3.4)$$

siendo θ el multiplicador de Lagrange. Es bien conocido que cualquier mínimo local del problema (3.2) debe satisfacer las siguientes condiciones de optimalidad (Edgar y Himmelblau, 1988):

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}_{NICN}} = 2\Psi^{-1} \mathbf{x}_{NICN} - 2\theta \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x}_{NICN} - 2\Psi^{-1} \mathbf{x} = \mathbf{0}, \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \theta} = \mathbf{x}_{NICN}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x}_{NICN} - T_C^2 = 0. \quad (3.6)$$

Si se minimiza la distancia de Mahalanobis entre \mathbf{x} y \mathbf{x}_{NICN} , es decir $\Psi = \mathbf{R}$, la ecuación (3.5) se reescribe de la siguiente manera:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}_{NICN}} = 2(1 - \theta) \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x}_{NICN} - 2\mathbf{R}^{-1} \mathbf{x} = \mathbf{0}. \quad (3.7)$$

El \mathbf{x}_{NICN} se despeja de la ecuación anterior y queda definido en términos de \mathbf{x} y θ de la siguiente manera:

$$\mathbf{x}_{NICN} = d \mathbf{x}, \quad (3.8)$$

siendo $d = (1 - \theta)^{-1}$. Luego d se calcula reemplazando la Ec. (3.8) en la Ec. (3.6)

$$d^2 (\mathbf{x} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{x}) - T_C^2 = d^2 T_x^2 - T_C^2 = 0, \quad (3.9)$$

$$d = \pm \left(\frac{T_C^2}{T_x^2} \right)^{1/2}, \quad (3.10)$$

donde T^2 es el estadístico correspondiente al vector observación \mathbf{x} .

Dado que d puede tomar sólo dos valores, que son de igual magnitud y signo contrario, la comparación de la función objetivo en las dos posibles soluciones es mucho más fácil que evaluar la derivada segunda de la función de Lagrange, para decidir cuál de ellas es la que corresponde al NICN.

La solución del problema de optimización para la situación más general, es decir $\Psi \neq \mathbf{R}$, requiere el uso de técnicas de programación no lineal. Sin embargo el costo computacional asociado al cálculo de diferentes formas de distancia no incrementa significativamente. Las coordenadas del NICN dependen de la selección de esta medida de distancia. Para ilustrar este tema, se considera el caso de estudio bidimensional representado en la Figura 3.1. Se asume que la población de referencia está centrada en el punto $[0,0]$, y existen dos puntos de observación fuera de control, $p_1 = [-1,2]$ y $p_2 = [2,0]$. La figura muestra tres tipos de curvas de nivel. Una de ellas corresponde a los valores del T^2 (líneas llenas en negrita), las cuales son elipses alrededor del punto $[0,0]$. Las dos restantes corresponden a la definida por la distancia Euclídea (líneas llenas), que son círculos alrededor de las dos observaciones fuera de control, y a la distancia de Mahalanobis (líneas punteadas) desde las observaciones fuera de control. También se representan en el gráfico los puntos de intersección entre las curvas correspondientes al valor del estadístico y las líneas de distancia y se los une mediante una línea. Debe notarse que la línea recta está definida por los vecinos cuando $\Psi = \mathbf{R}$. Por otro lado, cuando se considera la distancia Euclídea, las intersecciones siguen una curva no lineal.

Luego de calcular las coordenadas del NICN se estima la influencia de cada variable al valor del estadístico. Debido a que todas las variables han sido previamente estandarizadas, en esta tesis se propone considerar la distancia en la que cada variable medida debe ser modificada para alcanzar el NICN como la CV al T^2 , es decir:

$$c_j^{NICN} = \text{abs}(x_{j,NICN} - x_j), \quad (3.11)$$

donde c_j^{NICN} es la contribución de la j -ésima variable, $x_{j,NICN}$ y x_j son los j -ésimos elementos de los vectores \mathbf{x}_{NICN} y \mathbf{x} respectivamente. Los movimientos en cada una de las direcciones pueden representarse en los tradicionales gráficos de contribuciones y ser analizados de manera cualitativa para señalar el conjunto de variables sospechosas. En lugar de realizar una inspección visual, pueden compararse, de manera automática, las CVs con respecto a límites de control previamente establecidos.

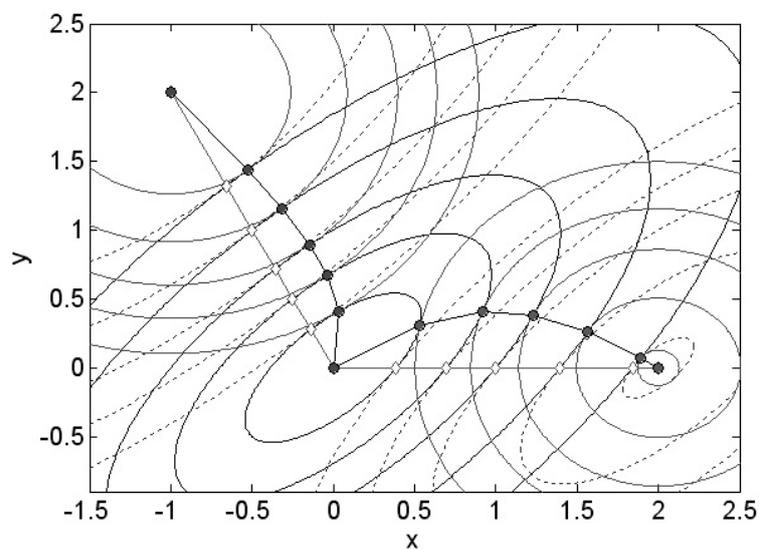


Figura 3.1: Diferentes posiciones del NICN dependiendo de la distancia seleccionada

Cabe notar que la mayoría de las técnicas de identificación existentes, a excepción de la propuesta por Godoy y col. (2013), determinan los límites de control de las CVs al estadístico aproximando la función de densidad de probabilidad (pdf) de éstas en condiciones operativas normales a alguna pdf conocida. La definición propuesta para las c_j^{NICN} ($j=1\dots J$) no permite emplear este enfoque, porque en su formulación intervienen un vector externo al hiperboloide (\mathbf{x}) y otro que pertenece a él (\mathbf{x}_{NICN}), mientras que la PR se encuentra contenida en el interior de dicho hiperboloide con una probabilidad $(1-\alpha)$.

Se estudiaron diferentes alternativas para establecer los límites de control, τ_j^{NICN} , para las c_j^{NICN} . Una de ellas consistió en calcular la media y el desvío estándar de los elementos del vector \mathbf{c}^{NICN} , y fijar límites de control empíricos, por ejemplo, el valor de la media más tres desvíos estándares. También se analizó el desempeño de límites de control empíricos basados en la mediana muestral y la mediana de los valores absolutos de las diferencias entre los elementos de \mathbf{c}^{NICN} y la mediana muestral (Maronna y col., 2006). Estas prácticas no produjeron buenos resultados para el aislamiento de las variables sospechosas.

Con el fin de establecer los τ_j^{NICN} de manera formal, se asumió la disponibilidad de una simulación de estado estacionario del proceso continuo. Esta herramienta permite conocer los valores de las variables de salida del sistema ante cambios de las variables de entrada de diversa magnitud. La técnica propuesta por Cedeño y col. (2012) para determinar el τ_j^{NICN} consiste en simular diferentes fallas que no se revelan mediante la j -ésima variable y calcular la c_j^{NICN} en estos casos. Así se genera la distribución empírica de la variable aleatoria c_j^{NICN} dada la condición de que la falla no se observa mediante esta variable, y se determina cuál es el valor de c_j^{NICN} para el cual su probabilidad acumulada es $(1 - \alpha)$. Dicho valor se selecciona como τ_j^{NICN} . Durante el monitoreo del proceso, si se verifica que $c_j^{NICN} > \tau_j^{NICN}$, la j -ésima variable se incluye dentro del conjunto de las sospechosas con una probabilidad de cometer Error Tipo I igual a $\alpha \in [0.05-0.1]$.

Cabe notar que para fijar los límites de control se requiere de una simulación dinámica del proceso en estudio o un conjunto grande de datos de falla. De esta manera se puede obtener un límite de control confiable.

3.3 Implementación de la Estrategia de Monitoreo

A continuación se detallan aspectos relacionados a la implementación de la estrategia de monitoreo basada en el concepto del NICN para procesos continuos.

3.3.1 Etapa I

En la etapa de modelado se emplean los datos históricos del proceso en condiciones de operación normales, contenidos en la PR, con el fin de definir \mathbf{R} y T_c^2 . También se utilizan datos simulados de operaciones anormales y con ellos se evalúan los τ_j^{NICN} ($j=1 \dots J$).

A partir de datos históricos del proceso se seleccionan I muestras de J observaciones que constituyen la PR. Esta se representa mediante una matriz $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{I \times J}$. Luego se calcula el vector de medias muestrales $\bar{\mathbf{z}}$ y el vector de desvíos estándares muestrales, $\boldsymbol{\sigma}_z$, con los cuales se estandariza \mathbf{Z} . Los datos de la PR centrados y escalados forman la matriz \mathbf{X} . Posteriormente se evalúa \mathbf{R} , y se la invierte. Se almacenan los vectores $\bar{\mathbf{z}}$ y $\boldsymbol{\sigma}_z$ y la inversa de la matriz de correlación, \mathbf{R}^{-1} .

Además la matriz \mathbf{X} se emplea para determinar el T_c^2 para un dado nivel de significado α . Se utiliza la técnica KDE para determinar el valor del estadístico tal que su probabilidad acumulada es $(1 - \alpha)$ y se lo almacena.

Con el fin de calcular τ_j^{NICN} , se determina la c_j^{NICN} en situaciones de fallas tales que la situación anormal no se observa mediante la j -ésima variable. Se realiza un número suficiente de simulaciones que permitan estimar la pdf empírica de c_j^{NICN} , en base a la cual se establece el límite superior τ_j^{NICN} usando la técnica KDE.

3.3.2 Etapa II

Durante la Etapa II, cada nueva observación \mathbf{z} se centra y estandariza utilizando los vectores $\bar{\mathbf{z}}$ y $\sigma_{\mathbf{z}}$, respectivamente. Luego se calcula el T^2 y si éste excede su valor crítico durante 3 instantes consecutivos, se realiza la identificación de las variables sospechosas. Se calculan las CVs al valor del T^2 (Ec. 3.11) y se las compara con sus límites de control. Aquellas variables que verifican la condición $c_j^{NICN} > \tau_j^{NICN}$ son las que revelan la falla del proceso.

3.4 Casos de Estudio

En esta sección se presentan los resultados de la aplicación de la estrategia propuesta a casos de estudio simples extraídos de la literatura. También se compara el desempeño del cálculo de las CVs en base al concepto del NICN en relación con el obtenido cuando estas métricas se evalúan siguiendo los trabajos de Alvarez y col. (2007), Westerhuis y col. (2000) y Alcalá y Qin (2009).

En relación con la metodología basada en el NICN, se resolvió el problema de optimización (3.2) empleando como función objetivo tanto la distancia de Mahalanobis como la Euclídea entre \mathbf{x} y \mathbf{x}_{NICN} . Como era de esperarse, el desempeño del procedimiento que utiliza la distancia de Mahalanobis es superior, dado que las variables se encuentran correlacionadas en los casos de estudio analizados. Por lo tanto, solamente los resultados obtenidos con la distancia de Mahalanobis se incluyen en este capítulo.

Con respecto a las estrategias propuestas por Alvarez y col. (2007) y Westerhuis y col. (2000), el límite de control para cada variable ($\tau_j^{Estadístico}$) se calcula en función de la media,

$\overline{c_j^{Estadístico}}$, y de la varianza, $\text{var}(c_j^{Estadístico})$, de las contribuciones de la j -ésima variable para las muestras de la PR, tal como se muestra a continuación:

$$\tau_j^{Estadístico} = \overline{c_j^{Estadístico}} + \kappa_j \sqrt{\text{var}(c_j^{Estadístico})}, \quad (3.12)$$

El parámetro κ_j se selecciona de manera tal que se produzcan los mejores resultados de identificación para el caso de estudio analizado.

En cuanto a la estrategia presentada por Alcalá y Qin (2009), los límites de control para las CVs al Estadístico Combinado (γ), que se denotan como τ_j^γ , se calculan considerando que dichas contribuciones siguen una distribución $g_{CV}\chi^2(1)$, tal como se indicó en el Capítulo 2.

El nivel de significado para todos los test de hipótesis realizados, tanto en la fase de detección como de identificación, se fija en $\alpha=0.05$. Si bien los ejemplos de aplicación comprenden PR relativamente pequeñas, éstas se mantienen como en las versiones originales con el fin de reproducir los resultados.

3.4.1 Caso de Estudio I

Se considera el conjunto de datos presentado por De Maesschalck y col. (2000) como PR. Esta se forma con 20 observaciones de cuatro variables, las cuales se reportan en la Tabla 3.1. El vector de medias muestrales es $\bar{\mathbf{z}} = [6, 5.35, 3.125, 3.245]$. A fin de analizar el comportamiento de diferentes métodos de identificación, se definen las siete observaciones de prueba (Cedeño y col., 2012) incluidas en la Tabla 3.2. En esta también se muestran los valores del T^2 para cada medición y el valor del T_c^2 . Se observa que $T^2 > T_c^2$ para las siete mediciones y esto se resalta en negritas subrayadas.

Tabla 3.1: Ejemplo numérico (De Maesschalck y col., 2000)

Observación	X ₁	X ₂	X ₃	X ₄
1	4.00	3.00	1.00	2.00
2	5.00	4.00	2.00	3.50
3	8.00	7.00	3.00	4.00
4	8.00	6.00	5.00	4.00
5	9.00	7.00	2.00	3.00
6	6.00	3.00	5.00	3.00
7	6.00	5.00	3.00	2.50
8	10.00	8.00	2.00	3.00
9	2.00	3.00	1.50	3.40
10	4.00	4.00	3.00	3.00
11	6.00	6.00	6.00	4.00
12	6.50	4.50	0.00	2.00
13	9.00	8.00	5.00	5.00
14	4.00	5.00	1.00	1.00
15	4.00	6.00	3.00	5.00
16	6.00	7.00	2.00	4.00
17	2.50	4.50	6.00	4.00
18	5.00	5.50	8.00	3.00
19	7.00	5.50	1.00	2.50
20	8.00	5.00	3.00	3.00

Tabla 3.2: Observaciones para el Caso de Estudio I

Tests	Observaciones	T ²
TEST ₁	[-1.099 5.350 3.125 3.245]	<u>24.029</u>
TEST ₂	[13.09 5.350 3.125 3.245]	<u>24.029</u>
TEST ₃	[-1.099 6.124 3.125 3.245]	<u>30.957</u>
TEST ₄	[13.09 4.576 3.125 3.245]	<u>30.957</u>
TEST ₅	[7.996 6.991 12.88 5.003]	<u>23.621</u>
TEST ₆	[3.782 9.376 3.498 6.998]	<u>31.299</u>
TEST ₇	[0.454 6.898 8.317 44.228]	<u>29.035</u>

$$T_{C,0.05}^2 = 14.997$$

El par de mediciones TEST₁/TEST₂ tiene una desviación de la misma magnitud pero de diferente signo para la variable 1. Por lo tanto estas observaciones se encuentran a la misma distancia euclídea de \bar{z} y, en consecuencia, tienen el mismo valor del estadístico. Este es independiente del signo de la desviación de la variable defectuosa porque las tres variables restantes se encuentran en sus valores medios. El mismo comportamiento se presenta para el par de mediciones TEST₃/TEST₄, en las cuales dos variables se desvían respecto de su media. En este caso las desviaciones de las variables 1 y 2 para el TEST₄ tienen la misma magnitud

pero diferente signo con respecto a las correspondientes al TEST₃. Cabe aclarar que la modificación de la variable 2 está dentro de su variabilidad normal. En relación con las restantes observaciones, la variable 3 presenta una desviación significativa con respecto a la media en el TEST₅, la misma situación ocurre para las variables 2 y 4 en el TEST₆, y para las variables 1 y 3 en el TEST₇.

Con el fin de calcular el límite de control para la j -ésima variable, τ_j^{NICN} , se simulan 100 fallas. En cada una de ellas, una variable del conjunto de las $(J-1)$ observaciones restantes se desvía con respecto a su valor normal. La selección de la variable cuyo valor se modifica se realiza de manera aleatoria. Con probabilidad uniforme, se elige: 1) un vector de la PR, 2) una variable distinta de la j -ésima del vector observación seleccionado en el paso previo, 3) el signo de la desviación respecto al valor promedio, 4) la magnitud de la desviación. El nuevo valor de la variable se representa mediante la siguiente ecuación

$$z_l = \bar{z}_l \pm mag \times \sigma_{z_l} \quad \forall l \neq j \quad (3.13)$$

donde l indica el índice de la observación donde se introduce la desviación y mag es uno de los 13 valores posibles pertenecientes al intervalo $[2,5]$ cuando se considera una variación de la magnitud igual a 0.2. Para cada una de las 100 fallas se calcula la c_j^{NICN} . Luego se aplica el procedimiento KDE para establecer el τ_j^{NICN} con una probabilidad de cometer Error Tipo I igual a α .

En las Tabla 3.3 y 3.4, se reportan las CVs al T^2 calculadas utilizando el método propuesto en esta tesis y las derivaciones de Alvarez y col. (2007), respectivamente. Las CVs que superan sus límites de control se indican en negritas y subrayadas. Para el TEST₆ y TEST₇, la estrategia OSS presenta identificación ambigua (Alvarez y col., 2010). Esto es, la causa original de la falla se señala como una variable sospechosa en conjunto con otras. En

contraste, el método basado en el cálculo del NICN provee identificaciones precisas para todas las observaciones de prueba, es decir, solamente las variables que se apartaron de su condición normal se indican como sospechosas.

Tabla 3.3: CVs – Método NICN - Caso de Estudio I

Observación	c_1^{NICN}	c_2^{NICN}	c_3^{NICN}	c_4^{NICN}
TEST ₁ , TEST ₂	<u>1.0596</u>	0.0000	0.0000	0.0000
TEST ₃ , TEST ₄	<u>2.5076</u>	0.3531	0.0000	0.0000
TEST ₅	0.0440	0.0069	<u>1.0006</u>	0.0624
TEST ₆	0.5124	<u>1.3438</u>	0.0380	<u>1.1454</u>
TEST ₇	<u>1.4209</u>	0.5457	<u>0.5177</u>	0.1865
τ_j^{NICN}	0.8278	0.8549	0.4188	1.0307

Tabla 3.4: CVs – Método OSS - Caso de Estudio I ($\kappa = 3$)

Observación	$c_1^{T^2}$	$c_2^{T^2}$	$c_3^{T^2}$	$c_4^{T^2}$
TEST ₁ , TEST ₂	<u>24.03</u>	0.000	0.000	0.000
TEST ₃ , TEST ₄	<u>27.14</u>	3.821	0.000	0.000
TEST ₅	1.065	-0.167	<u>24.23</u>	-1.511
TEST ₆	<u>5.411</u>	<u>14.19</u>	-0.401	<u>12.09</u>
TEST ₇	<u>17.95</u>	<u>6.896</u>	<u>6.541</u>	-2.357
τ_j^{OSS}	4.1594	5.5600	6.0892	6.5309

En los trabajos de Westerhuis y col. (2000) y Alcalá y Qin (2009) se obtiene un modelo empírico del sistema, en términos de variables latentes, con el fin de inspeccionarlo usando

Análisis de Componentes Principales (PCA). Dada la PR contenida en la Tabla 3.1, se formulan dos modelos diferentes. En el primero se retienen dos Componentes Principales (CPs) y se consigue un porcentaje de reconstrucción de la varianza total ($\% \sigma_T^{2,accum}$) igual al 82,6%. En el segundo, el número de CPs retenidos (Rt) es 3 y $\% \sigma_T^{2,accum} = 95\%$. Para ambos modelos, la Tabla 3.5 muestra los valores del D^2 y del SPE correspondientes a las observaciones incluidas en la Tabla 3.2. Los valores resaltados en negrita y subrayados indican que los estadísticos excedieron sus valores críticos.

Tabla 3.5: Estadísticos D^2 , SPE y γ - PCA - Caso de Estudio I

Observación	D^2	SPE	γ	Rt
TEST ₁ , TEST ₂	5.75	<u>3.68</u>	<u>5.49</u>	3
TEST ₃ , TEST ₄	5.17	<u>5.18</u>	<u>7.37</u>	3
TEST ₅	<u>23.62</u>	0.01	<u>3.02</u>	3
TEST ₆	<u>24.28</u>	<u>1.41</u>	<u>4.93</u>	3
TEST ₇	7.79	<u>4.27</u>	<u>6.53</u>	3
TEST ₁ , TEST ₂	3.46	<u>4.81</u>	<u>2.75</u>	2
TEST ₃ , TEST ₄	2.66	<u>6.43</u>	<u>3.35</u>	2
TEST ₅	<u>13.86</u>	<u>4.83</u>	<u>4.50</u>	2
TEST ₆	6.72	<u>10.11</u>	<u>5.69</u>	2
TEST ₇	7.77	<u>4.28</u>	<u>3.23</u>	2
	$D_{C,0.05}^2=11.2550$	$SPE_{C,0.05}=0.8100$	$\gamma_{C,0.05}=1,5875$	3
	$D_{C,0.05}^2=7.8793$	$SPE_{C,0.05}=2.3866$	$\gamma_{C,0.05}=1,5791$	2

Las capacidades de detección del D^2 se ven notablemente afectadas por la reducción de la dimensionalidad. Si $Rt=2$, solamente el TEST₅ se detecta como una falla; en cambio si Rt se incrementa a 3, el D^2 indica que tanto el TEST₅ como el TEST₆ corresponden a estados anormales. En consecuencia, solo se calculan las CVs al D^2 ($c_j^{D^2}$, $j=1\dots J$) para las

observaciones TEST₅ y TEST₆. En la Tabla 3.6 se muestran los valores de las $c_j^{D^2}$ calculados empleando la Ec. (2.39) y se resaltan aquellas contribuciones que exceden sus límites de control. Estos se evalúan a partir de la Ec. (2.41) (Westerhuis y col., 2000) asumiendo que $\kappa = 2$. Se observa que la identificación de las variables que originan el estado anormal es precisa para $Rt=3$ y es ambigua para $Rt=2$.

Tabla 3.6: CVs al D^2 ($\kappa=2$) - Caso de Estudio I

Observación	$c_1^{D^2}$	$c_2^{D^2}$	$c_3^{D^2}$	$c_4^{D^2}$	D^2	Rt
TEST ₅	0.9895	-0.0597	<u>24.283</u>	-1.5957	<u>23.62</u>	3
TEST ₆	1.8727	<u>3.1415</u>	-0.4813	<u>19.750</u>	<u>24.28</u>	3
$\tau_j^{D^2}$	2.3241	1.4803	4.1123	3.2903		3
TEST ₅	-0.3388	0.4311	<u>10.241</u>	<u>3.5294</u>	<u>13.86</u>	2
$\tau_j^{D^2}$	1.7639	1.4899	1.7755	1.6151		2

Tabla 3.7: CVs al SPE ($\kappa=2$) - Caso de Estudio I

	c_1^{SPE}	c_2^{SPE}	c_3^{SPE}	c_4^{SPE}	SPE	
TEST ₁ , TEST ₂	<u>1.3195</u>	<u>1.9035</u>	<u>0.0210</u>	<u>0.4317</u>	<u>3.68</u>	3
TEST ₃ , TEST ₄	<u>1.8612</u>	<u>2.6850</u>	<u>0.0296</u>	<u>0.6090</u>	<u>5.18</u>	3
TEST ₆	<u>0.5061</u>	<u>0.7301</u>	<u>0.0081</u>	<u>0.1656</u>	<u>1.41</u>	3
TEST ₇	<u>1.5335</u>	<u>2.2123</u>	<u>0.0244</u>	<u>0.5018</u>	<u>4.27</u>	3
τ_j^{SPE}	0.2919	0.4211	0.0046	0.0955		3
TEST ₁ , TEST ₂	<u>2.2580</u>	<u>2.2223</u>	0.3267	0.0014	<u>4.81</u>	2
TEST ₃ , TEST ₄	<u>3.0122</u>	<u>3.0804</u>	0.3359	0.0027	<u>6.43</u>	2
TEST ₅	<u>0.5595</u>	0.0623	<u>2.1838</u>	<u>2.0269</u>	<u>4.83</u>	2
TEST ₆	<u>2.8639</u>	<u>1.3508</u>	<u>3.5944</u>	<u>2.2990</u>	<u>10.11</u>	2
TEST ₇	<u>1.4511</u>	<u>2.1809</u>	0.0504	0.5998	<u>4.28</u>	2
τ_j^{SPE}	0.5184	0.4449	0.9092	0.9908		2

Tabla 3.8: CVs al γ - Caso de Estudio I

	c_1^γ	c_2^γ	c_3^γ	c_4^γ	γ	
TEST ₁ , TEST ₂	10.2396	3.5192	0.3467	0.0279	5.49	3
TEST ₃ , TEST ₄	12.3013	5.6451	0.3785	0.0020	7.37	3
TEST ₅	1.0497	0.0255	14.3336	1.1258	3.02	3
TEST ₆	7.7294	4.8933	5.4179	9.6132	4.93	3
TEST ₇	7.3149	4.3476	2.0011	0.2184	6.53	3
τ_j^γ	0.9319	0.9744	0.5131	0.7505		3
TEST ₁ , TEST ₂	10.2396	5.8212	0.1981	4.6904	5.49	2
TEST ₃ , TEST ₄	13.6602	8.4839	0.3354	7.0736	7.37	2
TEST ₅	0.0918	0.0023	14.2610	0.1185	3.02	2
TEST ₆	4.6786	3.1889	1.6799	0.2240	4.93	2
TEST ₇	10.4454	6.9513	6.3015	6.6634	6.53	2
τ_j^γ	0.5056	0.4024	0.8031	0.7320		2

Por su parte, el *SPE* excede su valor crítico para todos los test, excepto el TEST₅ si $Rt=3$. El procedimiento PCA tradicional detecta el estado fuera de control para todas las observaciones de prueba, dado que el D^2 o el *SPE* superan sus valores críticos, o esta condición se satisface para ambos simultáneamente.

La Tabla 3.7 muestra las CVs al *SPE* ($c_j^{SPE}, j=1 \dots J$), definidas mediante la Ec. (2.40). Si $Rt=3$, se observa que todas las c_j^{SPE} superan sus límites de control, τ_j^{SPE} , evaluados mediante la Ec. (2.44). La mayor parte de ellas también son mayores que sus respectivos τ_j^{SPE} si $Rt=2$. Por lo tanto resulta complejo determinar el verdadero origen de la anomalía del sistema con esta información. Además la identificación para el TEST₇ si $Rt=2$ es incorrecta, porque una de las variables que se desvían de su condición normal no se indica como sospechosa.

Cuando se emplea el γ durante la fase de detección, se declara que todas las observaciones de prueba corresponden a eventos anormales, sin importar el valor de Rt . En la Tabla 3.8 también se presentan las CVs al γ , c_j^γ , calculadas empleando la Ec. (2.49) y se señalan aquellas que superaron sus límites críticos, τ_j^γ . Se observa que la única identificación perfecta corresponde al TEST5 cuando $Rt = 2$. Por el contrario, en el TEST6 no se señala la variable 4 como defectuosa. Los restantes casos corresponden a identificaciones ambiguas, ya que en ellos se señalan como sospechosas a las variables que realmente modificaron su comportamiento con respecto al normal, junto con otras que no lo hicieron. Estos resultados muestran una asignación no tan clara del origen del evento anormal en relación con los obtenidos con las estrategias en el espacio de las VOs.

3.4.2 Caso de Estudio II

El segundo caso de estudio comprende un reactor tubular en el cual se produce la reacción $A + B \rightarrow 3C$. El conjunto de variables medidas está conformado por diez mediciones: las composiciones de entrada de A, B y C, las temperaturas de alimentación al reactor y de entrada de refrigerante, el caudal de alimentación al reactor, la temperatura del reactor a los 10 y 20 metros y la temperatura y concentración de C a la salida de la unidad. Las mismas se identifican como variables 1 a 10 en ese orden. La PR está formada por treinta y siete observaciones, tales que $\bar{\mathbf{z}}$ y la matriz de covarianza se muestran en la Tabla 3.9

Además se simularon siete experiencias adicionales para comparar el desempeño de las diferentes estrategias de identificación, tal como se hizo en el ejemplo anterior. Cada simulación de un evento anormal se indica como Re ($e=1\dots7$). Las primeras seis fallas se originan por desviaciones individuales de las variables 1 a la 6 con respecto a sus valores normales. Para R7, se asumen desviaciones de las variables 4 y 5. El vector \mathbf{x} y el valor del T^2

para cada observación de prueba se muestran en la Tabla 3.10. Esta también incluye el valor del T_c^2 para $\alpha=0.05$.

Tabla 3.9: Ejemplo del Reactor Tubular

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Media	0.2108	4.0603	0.0019	624.32	624.79	0.0997	634.61	628.89	627.00	0.5718
Cov	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0.0001	0.0002	0.0000	-0.0478	-0.0002	0.0000	0.0051	0.0023	0.0004	0.0002
2	0.0002	0.0202	0.0000	-0.7030	-0.0078	0.0001	0.0328	0.0065	-0.0135	0.0011
3	0.0000	0.0000	0.0000	-0.0004	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
4	-0.0478	-0.7030	-0.0004	111.79	2.5101	0.0003	-7.9096	-1.2522	1.4182	-0.1076
5	-0.0002	-0.0078	0.0000	2.5101	1.0006	0.0003	0.6604	0.6321	0.8944	0.0035
6	0.0000	0.0001	0.0000	0.0003	0.0003	0.0000	0.0003	0.0002	0.0003	0.0000
7	0.0051	0.0328	0.0000	-7.9096	0.6604	0.0003	1.3926	0.7216	0.6898	0.0144
8	0.0023	0.0065	0.0000	-1.2522	0.6321	0.0002	0.7216	0.7668	0.6041	0.0081
9	0.0004	-0.0135	0.0000	1.4182	0.8944	0.0003	0.6898	0.6041	0.8229	0.0041
10	0.0002	0.0011	0.0000	-0.1076	0.0035	0.0000	0.0144	0.0081	0.0041	0.0005

Tabla 3.10: Observaciones estandarizadas y T^2 para el Caso de Estudio II

	X1	X2	X3	X4	X5	X6	X7	X8	X9	X10	T^2
R1	-3.977	0.442	-1.177	-0.839	1.542	-0.107	-0.356	0.278	0.190	-4.273	<u>300.694</u>
R2	-0.189	4.298	-1.367	-0.891	-1.037	-1.173	-0.017	-0.364	-0.374	0.690	<u>168.980</u>
R3	1.018	-1.203	-5.410	0.168	0.792	-0.949	0.426	0.625	0.425	0.828	<u>76.026</u>
R4	0.274	0.004	-0.387	2.448	1.377	-0.003	-0.524	-0.536	-0.074	-0.517	<u>210.162</u>
R5	-0.494	0.500	-0.095	0.500	3.281	0.694	-0.164	0.375	0.371	-0.168	<u>940.534</u>
R6	-1.066	1.487	0.542	-0.048	-0.328	3.982	0.563	0.367	0.189	-0.300	<u>105.990</u>
R7	0.003	0.500	-0.095	-1.500	-2.633	0.694	1.038	0.416	0.029	-0.053	<u>748.924</u>

$$T_{C,0.05}^2 = 30.2$$

Con el fin de calcular cada uno de los τ_j^{NICN} se simulan fallas en la operación del reactor con el mismo criterio de aquellas realizadas para el caso de estudio I. Para la variable j -ésima de entrada al sistema ($j=1:6$), se simularon 150 eventos en los cuales el valor del estadístico resultó superior al crítico pero la variable j -ésima presentó un comportamiento similar al de la PR. Se calcularon la c_j^{NICN} para cada una de las 150 simulaciones y mediante la técnica KDE se estimó el τ_j^{NICN}

Luego se emplearon los resultados de las 900 simulaciones previamente realizadas con el fin de determinar dichos límites para las restantes. Se seleccionaron 150 eventos anormales del conjunto de 900 simulaciones en los cuales la j -ésima variable ($j=7:10$) tiene un comportamiento normal, y en base a los valores calculados para la c_j^{NICN} en esos casos, se establecieron los límites empleando la metodología KDE.

En la Tabla 3.11 y Tabla 3.12 se reportan las CVs al T^2 calculadas utilizando la técnica basada en el concepto del NICN y la OSS, respectivamente. Para este caso de estudio, todas las observaciones mediante las cuales se manifiesta la falla se identifican como sospechosas utilizando la metodología propuesta en esta tesis. Para R1 se observa que el cambio simulado en la composición de entrada de A lleva a que la composición de salida de C se encuentre fuera de su región normal. En la Tabla 3.12 puede verse que la estrategia OSS presenta una identificación precisa para R5, mientras que para el resto se muestra identificaciones ambiguas.

Tabla 3.11: CVs – Método NICN - Caso de Estudio II

	c_1^{NICN}	c_2^{NICN}	c_3^{NICN}	c_4^{NICN}	c_5^{NICN}	c_6^{NICN}	c_7^{NICN}	c_8^{NICN}	c_9^{NICN}	c_{10}^{NICN}
R1	<u>2.717</u>	0.302	0.804	0.573	1.053	0.073	0.243	0.189	0.129	<u>2.919</u>
R2	0.109	<u>2.482</u>	0.789	0.514	0.599	0.677	0.010	0.210	0.216	0.398
R3	0.376	0.445	<u>2.001</u>	0.062	0.293	0.351	0.158	0.231	0.157	0.306
R4	0.170	0.003	0.240	<u>1.520</u>	0.855	0.002	0.325	0.333	0.046	0.321
R5	0.406	0.410	0.078	0.410	<u>2.693</u>	0.569	0.135	0.308	0.305	0.138
R6	0.497	0.694	0.253	0.022	0.153	<u>1.857</u>	0.262	0.171	0.088	0.139
R7	0.002	0.399	0.076	<u>1.199</u>	<u>2.105</u>	0.555	0.829	0.332	0.024	0.043
τ_j^{NICN}	1.086	1.045	1.109	1.113	1.066	1.035	1.016	0.809	0.550	0.552

Se formuló un modelo PCA para el mismo conjunto de datos. Si $Rt=3$, el $\% \sigma_T^{2,acum}$ =74.5% y se reduce a 64% para $Rt=2$. En relación con la capacidad de detección del D^2 , ninguna observación de prueba se detectó como un evento anormal si $Rt=2$. En cambio, si se emplea el modelo con $Rt=3$, R1 y R3 se detectan como observaciones del proceso fuera de

control. Las $c_j^{D^2}$ se presentan en la Tabla 3.13 y se observa que las principales contribuciones corresponden a las variables cuyas desviaciones se simularon, presentando una identificación perfecta en R1 y una identificación ambigua en R3. En cuanto al estadístico SPE, éste detecta que el proceso se encuentra fuera de control para todas las corridas, pero ninguna identificación es precisa, como se muestra en la Tabla 3.13. Además la identificación para R4 es incorrecta.

Tabla 3.12: CVs – Método OSS - Caso de Estudio II ($\kappa=3$)

	$c_1^{T^2}$	$c_2^{T^2}$	$c_3^{T^2}$	$c_4^{T^2}$	$c_5^{T^2}$	$c_6^{T^2}$	$c_7^{T^2}$	$c_8^{T^2}$	$c_9^{T^2}$	$c_{10}^{T^2}$
R1	<u>34.19</u>	-11.41	2.819	<u>49.39</u>	<u>262.2</u>	-0.493	13.97	2.207	-27.22	-24.97
R2	-0.895	<u>108.0</u>	3.479	-30.54	<u>134.1</u>	3.892	-0.337	0.946	-43.54	-6.167
R3	-18.68	<u>13.83</u>	<u>43.05</u>	-1.213	<u>48.97</u>	-0.705	4.017	2.885	-30.64	14.51
R4	7.892	0.002	0.139	<u>53.73</u>	<u>142.9</u>	-0.002	-18.44	0.210	9.181	14.58
R5	12.18	-25.05	0.144	-37.73	<u>1101</u>	3.688	5.274	2.827	-117.0	-5.231
R6	19.84	<u>17.70</u>	-1.857	-1.741	26.51	<u>15.45</u>	<u>23.12</u>	0.563	8.928	-2.529
R7	0.036	<u>21.67</u>	0.078	-98.58	<u>785.9</u>	-1.812	<u>34.04</u>	-1.690	8.115	1.121
τ_j^{OSS}	28.47	8.44	4.09	23.43	41.17	3.90	22.94	5.85	50.99	22.27

El estadístico γ detecta como estados fuera de control las observaciones de prueba R1, R2, R3 y R6, tanto cuando se retienen 2 como 3 CPs. Los resultados de la identificación son ambiguos, ya que además de seleccionar a las variables que sufrieron desviaciones con respecto a su condición normal también se señalan otras, lo que amplía el conjunto de variables sospechosas. Los valores del γ para el caso de estudio II, así como las c_j^z contribuciones se presentan en la Tabla 3.14.

Tabla 3.13: Contribuciones a los estadísticos D^2 y SPE para el Caso de Estudio II ($\kappa = 3$)

	$c_1^{D^2}$	$c_2^{D^2}$	$c_3^{D^2}$	$c_4^{D^2}$	$c_5^{D^2}$	$c_6^{D^2}$	$c_7^{D^2}$	$c_8^{D^2}$	$c_9^{D^2}$	$c_{10}^{D^2}$	D^2	Rt
R1	<u>6.391</u>	0.185	-1.669	-0.215	0.670	0.062	0.036	0.040	0.060	<u>5.863</u>	<u>11.42</u>	3
R3	1.622	<u>2.121</u>	<u>15.82</u>	0.165	0.108	-0.719	-0.133	-0.042	0.108	1.086	<u>20.13</u>	3
$\tau_j^{D^2}$	1.763	1.718	2.221	1.283	1.297	0.580	0.939	1.010	1.248	1.489		3
	c_1^{SPE}	c_2^{SPE}	c_3^{SPE}	c_4^{SPE}	c_5^{SPE}	c_6^{SPE}	c_7^{SPE}	c_8^{SPE}	c_9^{SPE}	c_{10}^{SPE}	SPE	
R1	<u>1.005</u>	0.593	<u>5.478</u>	<u>5.262</u>	<u>0.665</u>	0.710	0.314	0.184	0.100	<u>2.569</u>	<u>16.88</u>	3
R2	<u>0.497</u>	<u>9.702</u>	<u>4.889</u>	0.179	0.012	1.296	0.016	0.027	<u>0.550</u>	0.077	<u>17.25</u>	3
R3	<u>0.391</u>	0.897	<u>4.388</u>	<u>1.340</u>	0.109	3.202	0.516	0.263	0.026	0.295	<u>11.43</u>	3
R4	<u>0.555</u>	0,086	0,672	0,759	<u>1.799</u>	0,530	<u>0.771</u>	0,417	<u>0.343</u>	<u>0.667</u>	<u>6.599</u>	3
R5	0.001	0.843	0.084	0.015	<u>3.864</u>	0.506	0.441	0.311	<u>0.849</u>	0.008	<u>6.923</u>	3
R6	<u>1.146</u>	0.925	0.034	0.173	0.202	<u>16.22</u>	0.023	0.008	0.004	0.145	<u>18.88</u>	3
R7	<u>0.429</u>	0.110	0.301	0.215	<u>3.248</u>	0.380	<u>0.734</u>	0.548	<u>0.667</u>	0.375	<u>7.008</u>	3
τ_j^{SPE}	0.214	1.619	1.298	1.162	0.286	3.454	0.720	1.262	0.189	0.466		3
R1	<u>4.371</u>	<u>3.242</u>	0.262	<u>7.844</u>	<u>0.748</u>	0.126	0.594	0.299	0.119	<u>6.215</u>	<u>23.82</u>	2
R2	1.188	<u>12.11</u>	2.446	0.059	0.016	1.718	0.003	0.042	<u>0.535</u>	0.001	<u>18.11</u>	2
R3	<u>1.744</u>	0.802	<u>28.80</u>	0.063	0.058	0.844	0.117	0.091	0.012	1.099	<u>33.63</u>	2
R4	1.162	0.000	0.068	1.053	<u>1.758</u>	0.335	<u>0.888</u>	0.465	<u>0.333</u>	<u>1.186</u>	<u>7.248</u>	2
R5	0.014	1.014	0.018	0.028	<u>3.880</u>	0.449	0.417	0.300	<u>0.854</u>	0.000	<u>6.975</u>	2
R6	<u>1.993</u>	1.651	0.150	0.066	0.189	<u>15.01</u>	0.048	0.016	0.003	0.435	<u>19.56</u>	2
R7	0.645	0.037	0.090	0.283	<u>3.224</u>	0.303	<u>0.784</u>	0.572	<u>0.661</u>	0.537	<u>7.136</u>	2
τ_j^{SPE}	1.255	2.412	3.275	1.262	0.276	3.537	0.733	1.322	0.193	1.134		2
	$D_{C,0.05}^2 = 9.404$				$SPE_{C,0.05} = 5.378$							3
	$D_{C,0.05}^2 = 6.903$				$SPE_{C,0.05} = 6.707$							2

Tabla 3.14: Contribuciones al estadístico γ para el Caso de Estudio II

	c_1^γ	c_2^γ	c_3^γ	c_4^γ	c_5^γ	c_6^γ	c_7^γ	c_8^γ	c_9^γ	c_{10}^γ	γ	m
R1	8.74	1.63	2.05	6.69	2.30	0.15	0.33	0.44	0.01	11.53	4.13	3
R2	0.78	17.63	4.08	0.01	0.12	1.56	0.01	0.00	0.23	0.13	3.15	3
R3	0.73	0.31	28.61	0.20	0.33	1.46	0.32	0.31	0.00	0.42	4.38	3
R6	2.50	2.06	0.10	0.08	0.32	16.31	0.11	0.04	0.01	0.39	3.08	3
τ_j^γ	0.16	0.42	0.44	0.23	0.10	0.57	0.14	0.18	0.08	0.16		3
R1	11.77	1.36	0.67	4.21	2.85	0.02	0.18	0.49	0.03	14.46	3.68	2
R2	0.43	17.63	2.22	0.22	0.43	1.56	0.00	0.02	0.01	0.19	2.55	2
R3	1.67	1.32	30.56	0.00	0.42	0.91	0.19	0.30	0.05	1.08	4.03	2
R6	2.09	2.14	0.21	0.02	0.25	15.69	0.16	0.05	0.01	0.34	2.33	2
τ_j^γ	0.21	0.36	0.41	0.24	0.16	0.43	0.14	0.17	0.14	0.19		2
$\gamma_{C,0.05}=1.6150$												3
$\gamma_{C,0.05}=1.6108$												2

3.5 Conclusiones

En este capítulo se propone un nuevo enfoque para la identificación del conjunto de mediciones a través de las cuales se manifiesta el evento anormal, basado en el concepto del NICN. También se plantea una nueva forma de estimar la Contribución de la Variable (CV) al valor del estadístico usado en la fase de detección. En particular, se definen las CVs al T^2 dado que se desarrolla una estrategia de monitoreo en el espacio de las VOs. Sin embargo, el enfoque general de identificación puede extenderse a metodologías de inspección que aborden el problema en diferentes espacios de variables empleando distintos estadísticos.

Las CVs al estadístico se determinan en función de las coordenadas del vecino más cercano a la observación que se encuentra en control estadístico. Debido a que todas las variables han sido previamente estandarizadas, se propone considerar la distancia euclídea

entre las coordenadas de la observación y del NICN en cada dirección como la contribución de la respectiva variable T^2 . Las variables que revelan el estado de falla son aquellas cuyas contribuciones exceden sus límites de control. Estos se determinan empleado datos simulados de eventos anormales, en base a los cuales se estima la distribución de probabilidad empírica de la CV, cuando ésta no revela la falla. Luego se fija los límites de control de la CV mediante la metodología KDE.

El cálculo del estadístico T^2 asume que la matriz de correlación no es singular. Los inconvenientes que pueden surgir si esta condición no se satisface se abordan siguiendo las propuestas de Mason y Young (2002) y Bickel y Levina (2008).

Se observan algunas diferencias en las capacidades de identificación de las estrategias que abordan la inspección en el espacio de las VOs. Se considera que éstas surgen porque el procedimiento basado en el cálculo del NICN permite movimientos simultáneos de todas las variables al resolver el problema de optimización. En cambio la metodología OSS considera una sola curva paramétrica que define todos los posibles valores del estadístico como una función única de la variable analizada, para valores fijos de las restantes. Esto ocasiona que algunas contribuciones tomen valores negativos altos.

El método del NICN trabaja en el espacio de las variables originales y por lo tanto emplea solamente el estadístico T^2 . Esto evita la posible pérdida de información originada por la proyección en un espacio de CPs incorrectamente dimensionado, que puede llevar a fallas en la detección (Error Tipo II), y falsas alarmas (Error Tipo I), como se muestra en Alvarez y col. (2007). Por tal motivo, el efecto del evento anormal se asigna a diferentes observaciones haciendo compleja la identificación.

3.6 Referencias

- (1) Alcalá, C.; Qin, S. J. Reconstruction-Based Contribution for Process Monitoring. *Automatica*, **2009**, *45*, 1593-1600.
- (2) Alvarez, C. R.; Brandolin, A.; Sánchez, M. C. On the Variable Contributions to the D-Statistic. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2007**, *88* (2), 189-196.
- (3) Alvarez, C. R.; Brandolin, A.; Sánchez, M. C. Batch Process Monitoring in the Original Measurement's Space. *J. Process Control* **2010**, *20*, 716-725.
- (4) Bickel, P. J.; Levina, E. Regularized Estimation of Large Covariance Matrix. *Ann. Stat.* **2008**, *38*, 199-227.
- (5) Cedeño, M. V.; Rodríguez, L. P.; Alvarez, C. R.; Sánchez, M. C. A New Approach to Estimate Variable Contributions to Hotelling's Statistic. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2012**, *118*, 120-126.
- (6) De Maesschalck, R.; Jouan-Rimbaud, D.; Massart, D. L. The Mahalanobis distance. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2000**, *50*, 1-18.
- (7) Edgar, T. F.; Himmelblau, D. M. *Optimization of Chemical Processes*. McGraw-Hill Inc.: New York, 1988.
- (8) Maronna, R.; Martin, R.D.; Yohai, V. *Robust Statistics: Theory and Methods*. John Wiley and Sons Ltd.: Chichester, 2006.
- (9) Mason, R. L.; Young, J. C. *Multivariate Statistical Process Control with Industrial Applications*. ASA-SIAM Series on Statistics and Applied Probability: Philadelphia, Pennsylvania, 2002.
- (10) Westerhuis, J. A.; Gurden, S. P.; Smilde, A. K. Generalized Contribution Plots in Multivariate Statistical Process Monitoring. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2000**, *51* (1), 95-114.

Capítulo 4

4 Estrategia de Identificación basada en el Vecino en Control más Cercano: Procesos batch	99
4.1 Introducción	99
4.2 Nueva estrategia de monitoreo de procesos batch en el espacio de las variables originales.....	100
4.3 Implementación de la Estrategia de Monitoreo	111
4.3.1 Etapa I.....	111
4.3.2 Etapa II.....	111
4.4 Caso de Estudio	112
4.5 Resultados y Discusiones	115
4.6 Conclusiones	117
4.7 Referencias.....	119

Página en Blanco

4 Estrategia de Identificación basada en el Vecino en Control más Cercano: Procesos batch

4.1 Introducción

Los procesos por lotes o batch se utilizan principalmente para la fabricación de productos de alto valor agregado en pequeña o mediana escala, tales como: polímeros, productos farmacéuticos y biológicos, entre otros. El monitoreo en línea de un proceso batch es esencial para la seguridad y la producción rentable de productos de alta calidad. Es común que ocurran pequeños cambios en estos sistemas, que pueden crecer gradualmente hasta convertirse en problemas operacionales serios. Por lo tanto, la detección temprana de la falla y la identificación de las variables mediante las cuales se manifiesta permiten tomar acciones correctivas antes que el efecto de alguna desviación de la operación normal arruine el lote.

En este capítulo se presenta una nueva estrategia para el monitoreo de procesos batch que emplea los valores de las Variables Originales (VOs). Por lo tanto solo utiliza el estadístico de Hotelling (T^2) en la fase de detección. En relación con la de identificación, la nueva metodología aplica el concepto del Vecino en Control más Cercano (NICN), definido en el Capítulo 3, para calcular las Contribuciones de las Variables (CVs), pero efectúa el aislamiento de las mediciones sospechosas mediante un nuevo procedimiento. Este evita realizar las suposiciones inherentes a todas las estrategias existentes para evaluar los límites de control de las CVs, y también el costo computacional asociado al cálculo de dichos límites empleando el método descrito en el capítulo anterior. La nueva metodología propuesta se denomina NICNBP (NICN – Batch Processes). Se presentan resultados de la aplicación de la metodología propuesta a un caso de estudio simple.

4.2 Nueva estrategia de monitoreo de procesos batch en el espacio de las variables originales

Los procesos batch operan desde un cierto tiempo inicial a otro final. En una operación normal, las materias primas se colocan en el interior de los equipos, dentro de los cuales se las someten a una serie de cambios físicos y/o químicos que permiten obtener un producto de características diferentes a las existentes en las materias primas utilizadas.

Con el objetivo de operar un proceso batch de manera segura, satisfactoria y reproducible se debe seguir un procedimiento, cuyos pasos están comprendidos en la “receta” de la operación. En ella se detallan la duración de cada tarea, los niveles deseados de las variables de proceso y toda la información requerida para una operación satisfactoria.

Cuando se realiza el monitoreo de un proceso con estas características, se debe hacer el seguimiento de un conjunto de J variables del proceso en K instantes de muestreos, considerando que estos van desde un instante $t=0$ que corresponde a $k=1$, hasta el tiempo final final de la operación($t=t_{op}$) para el cual $k=K$. El período de muestro, como también la duración de cada batch se consideraran constantes en esta tesis.

El conjunto de mediciones generado por el proceso se almacena frecuentemente en una matriz tridimensional, que comprende los valores de las J variables de proceso monitoreadas, en los K instantes de muestreo, para una colección de I experiencias del proceso. Esta estructura multimodo se denota $\underline{\mathbf{Z}} \in \mathbb{R}^{I \times J \times K}$, y se ilustra en la Figura 4.1.

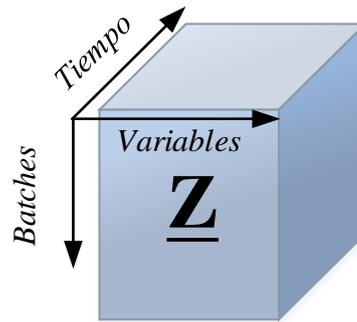


Figura 4.1: Estructura de datos en la matriz \underline{Z}

Una estrategia de monitoreo basada en datos necesita de una población representativa del proceso cuando éste se encuentra en operación normal. Dicha población, conocida como Población de Referencia (PR), contiene los datos de I corridas del proceso en las cuales se obtuvo un producto con características deseadas. La PR se usa en la Etapa I del monitoreo con el objetivo de generar un modelo estadístico para el seguimiento de nuevas operaciones del sistema.

La estructura tridimensional de datos de los procesos batch impide una aplicación directa de las estrategias vistas en el Capítulo 2 para procesos continuos. Se han realizado numerosos esfuerzos para generar diferentes arreglos de datos con el fin de utilizar las técnicas existentes, tal como se explicó en la sección 1.2.2.2.

Una de las tareas iniciales del análisis de estructuras multi-modo es el centrado y la estandarización de los datos contenidos en \underline{Z} . En tal sentido, Gurden y col. (2001) analizaron el escalado “slab” y el escalado “tube”. El primero promedia los $(I \times K)$ valores de la j -ésima variable contenidos en la PR, mientras que el segundo hace lo propio con los I valores de la variable correspondientes a un dado tiempo de muestreo k . Si bien dichos autores indicaron que la forma de escalado no influye de manera significativa en los resultados alcanzados cuando se aplican estrategias de proyección, en este trabajo de tesis se prefiere utilizar parámetros más representativos de la variación temporal del proceso y se selecciona el

método de escalado “tube”. Los datos estandarizados son útiles para manejar las diferencias en las unidades de medidas, y para estudiar la variación de la trayectoria de un batch en relación con la trayectoria media. La matriz tridimensional estandarizada se denota $\underline{\mathbf{X}}$.

Las estrategias multi-modo para monitoreo de procesos batch más utilizadas son las propuestas por Wold y col. (1987), Nomikos y MacGregor (1994; 1995), Wold y col. (1998), y Smilde y col. (2004). Estas realizan un Análisis de Componentes Principales (PCA) a un desdoblamiento particular de la matriz tridimensional, obteniendo un modelo global empíricos del proceso en términos de VLs.

Es común emplear dos desdoblamientos de la matriz tridimensional $\underline{\mathbf{X}}$. Uno de ellos fue propuesto por Lohmöller y Wold (1980), y consiste en disponer cada una de las porciones de $\underline{\mathbf{X}}$, definidas en la Ec. (4.1), de manera consecutiva cada una al costado derecho de la anterior, formando un arreglo rectangular definido por la Ec. (4.2) y conocido como batch-wise. El gráfico que muestra la forma de desdoblamiento horizontal se presenta en la Figura 4.2.

$$\underline{\mathbf{X}}_{(:,k)}, \forall k = 1, 2, \dots, K \quad . \quad (4.1)$$

$$\mathbf{X} = \left[\underline{\mathbf{X}}_{(:,1)}, \underline{\mathbf{X}}_{(:,2)}, \dots, \underline{\mathbf{X}}_{(:,K)} \right] \in \mathbb{R}^{I \times JK} \quad (4.2)$$

El otro desdoblamiento fue propuesto por Wold y col. (1998), y consiste en ubicar, de manera consecutiva, cada una de las porciones definidas por la Ec. (4.1) una debajo de la otra. Se forma el arreglo rectangular expresado en la Ec. (4.3), conocido como variable-wise. Este se muestra en la Figura 4.3

$$\mathbf{X} = \left[\underline{\mathbf{X}}_{(:,1)}; \underline{\mathbf{X}}_{(:,2)}; \dots; \underline{\mathbf{X}}_{(:,K)} \right] \in \mathbb{R}^{KI \times J} \quad . \quad (4.3)$$

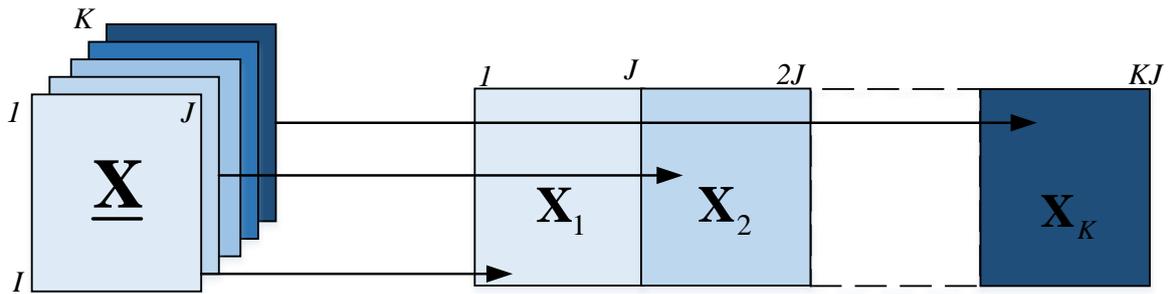


Figura 4.2: Esquema de desdoblamiento horizontal de la matriz de datos tridimensional $\underline{\mathbf{X}}$

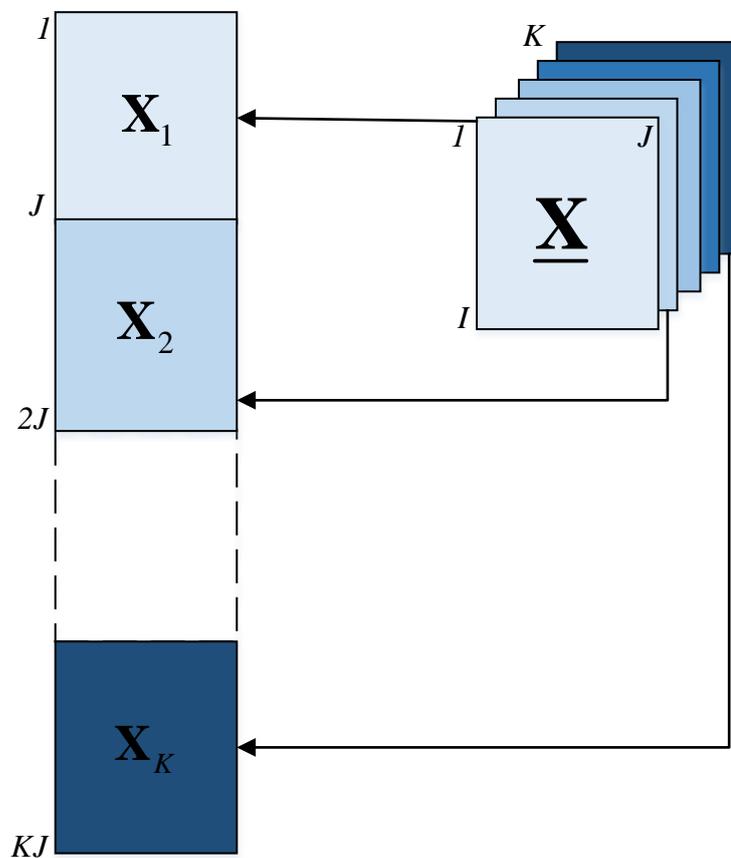


Figura 4.3: Esquema de desdoblamiento vertical de la matriz de datos tridimensional $\underline{\mathbf{X}}$

En el trabajo de tesis doctoral de Alvarez (2009) se hizo un estudio detallado acerca de la influencia del procedimiento de estandarización y del desdoblamiento sobre el desempeño de las estrategias multi-modo.

Por su parte Ramaker y col. (2005) compararon el desempeño de técnicas de monitoreo basadas en modelos globales en relación con el provisto por aquellas que utilizan modelos evolutivos o de ventana móvil (Lennox y col., 2001) y comprobaron que los modelos evolutivos tienen mejor desempeño para el monitoreo de procesos batch.

Una alternativa a los modelos mencionados anteriormente es aquella considerada por Alvarez y col. (2010), quienes emplearon con éxito modelos locales para el monitoreo de procesos batch. La metodología consiste en formar K modelos locales, cada uno de los cuales considera la porción de la matriz $\underline{\mathbf{X}}$ definida por la Ec. (4.1). La generación de un submodelo independiente para cada intervalo de muestreo permite aplicar cualquiera de las estrategias descriptas para procesos continuos, considerando las mediciones obtenidas en el intervalo k . Esta forma de modelar el comportamiento del proceso batch se selecciona en esta tesis.

Las relaciones entre las variables en cada intervalo de muestreo se estiman mediante la matriz de correlación \mathbf{R}_k , la cual se calcula utilizando las observaciones contenidas en la porción k -ésima de $\underline{\mathbf{X}}$, de la siguiente manera:

$$\mathbf{R}_k = \frac{\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k}{(I-1)}, \quad (4.4)$$

siendo \mathbf{X}_k , los datos estandarizados obtenidos para el k -ésimo intervalo de muestreo para las J observaciones de los I baches considerados en la PR:

Como se ha descrito anteriormente, las estrategias de monitoreo estadístico de procesos se componen de dos etapas, las cuales se ejecutan fuera de línea y en línea respectivamente. En la primera etapa se construye el modelo del proceso batch en condiciones operativas normales empleando las observaciones contenidas en la PR. Durante el monitoreo en línea, se calcula el T^2 en cada instante k ; y si su valor excede el límite establecido anteriormente en un

número dado de observaciones consecutivas, se declara el estado de falla y se inicia la etapa de identificación.

El primer paso de la etapa fuera de línea es el preprocesamiento de la matriz de datos. Cada columna de $\underline{\mathbf{Z}}$ se centra y se escala para obtener la matriz $\underline{\mathbf{X}}$, cuyas columnas tienen media cero y desvío estándar unitario.

Para cada instante de muestreo k , a continuación se calcula \mathbf{R}_k con la Ec. 4.4 y el valor del estadístico asociado a la observación correspondiente al i -ésimo batch. Este se evalúa de la siguiente manera:

$$T_{i,k}^2 = \mathbf{x}_{i,k}^T \mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{x}_{i,k}, \quad (4.5)$$

siendo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{J \times 1}$ la medición estandarizada. En función de los valores $T_{i,k}^2$ ($i=1 \dots J$) se determina el valor del estadístico crítico para el intervalo de muestreo k aplicando la estrategia Kernel Density Estimation (KDE). Este corresponde al valor de T_k^2 tal que su probabilidad acumulada es $(1-\alpha)$. Esta forma de calcular el valor crítico del estadístico para cada instante de muestreo, $T_{C,k}^2$, evita realizar suposiciones acerca de la función de densidad de probabilidad (pdf) de las observaciones del proceso, y los consiguientes errores cometidos cuando dichas suposiciones no se verifican en la práctica. Sin dudas, el hecho de emplear la metodología KDE aumenta la carga computacional de la estrategia propuesta. Sin embargo, dado que los cálculos se realizan en la etapa fuera de línea, es posible aplicar el método para el monitoreo en línea de una situación real.

El modelo del proceso en condiciones operativas normales está formado por \mathbf{R}_k y $T_{C,k}^2$ ($k=1 \dots K$), y se lo almacena. Un esquema gráfico de la etapa de modelado fuera de línea se presenta en la Figura 4.4

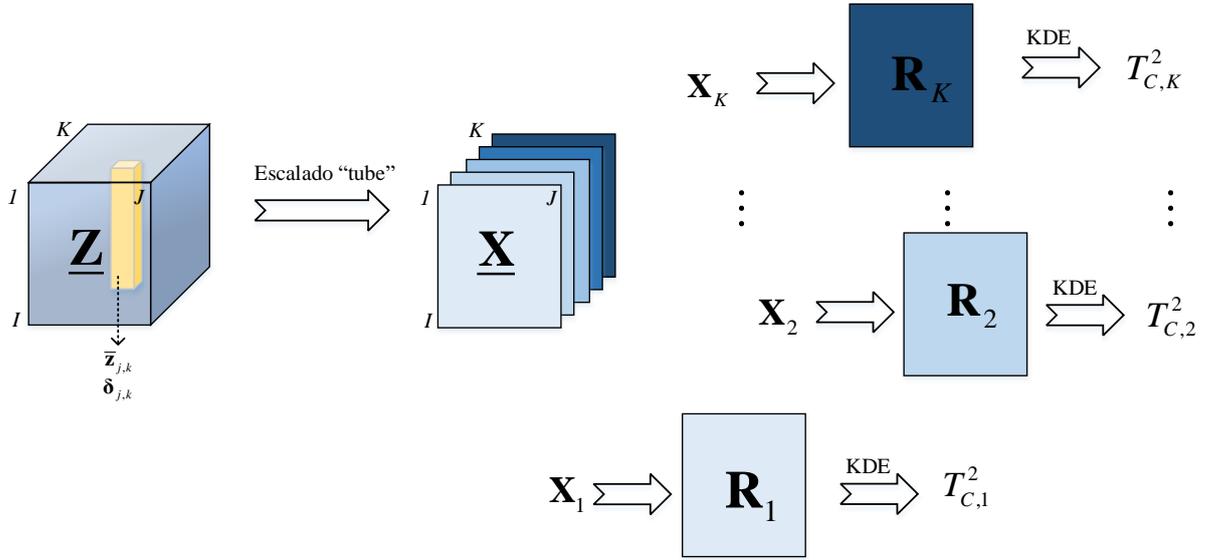


Figura 4.4: Etapa de modelado fuera de línea

Si durante tres observaciones consecutivas se verifica que $T_k^2 > T_{C,k}^2$, entonces se declara que el proceso está fuera de control estadístico y se procede a la identificación de las variables que revelan el estado anómalo mediante el cálculo de las CVs al estadístico.

En esta tesis se propone calcular las CVs al T^2 empleando el método propuesto por Cedeño y col. (2012), descrito en el capítulo anterior. Para tal fin se resuelve el siguiente problema de optimización

$$\begin{aligned}
 & \text{Min} \quad (\mathbf{x}_{NICN,k} - \mathbf{x}_k)^T \Psi^{-1} (\mathbf{x}_{NICN,k} - \mathbf{x}_k), \\
 & \text{s.t.} \\
 & \quad \mathbf{x}_{NICN,k}^T \mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{x}_{NICN,k} = T_{C,k}^2
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

siendo k el intervalo de muestreo en el cual se declara el estado fuera de control, $\mathbf{x}_{NICN,k}$ el NICN al vector observación \mathbf{x}_k y Ψ la matriz que define la medida de distancia entre $\mathbf{x}_{NICN,k}$ y \mathbf{x}_k . El $\mathbf{x}_{NICN,k}$ representa el vector medición más cercano a \mathbf{x}_k que se encuentra sobre la región de control estadístico del proceso. Si se asume que la medida de distancia que se minimiza entre $\mathbf{x}_{NICN,k}$ y \mathbf{x}_k es la distancia de Mahalanobis, entonces $\Psi = \mathbf{R}^{-1}$

El vector de contribuciones al T^2 se evalúa de la siguiente manera:

$$\mathbf{c}_k^{NICN} = |\mathbf{x}_{NICN,k} - \mathbf{x}_k| \quad (4.7)$$

La información contenida en \mathbf{c}_k^{NICN} indica cuán alejado está \mathbf{x}_k de una situación en control y cuáles son las direcciones que más explican dicho apartamiento. Es decir, cuanto mayor es la contribución de la j -ésima variable, mayor es el alejamiento de la variable con respecto a sus valores en operación normal.

La información contenida en el vector \mathbf{c}_k^{NICN} es necesaria pero no suficiente para determinar cuáles son las variables que revelen la situación anómala. Si bien, la distancia entre \mathbf{x}_k y su correspondiente NICN aumenta cuanto mayor es la magnitud de la falla, debido a que no se asume ningún modelo de falla, no se puede concluir que la mayor contribución es aquella que explica el comportamiento anómalo.

Cedeño y col. (2012) propusieron calcular los límites de control de las CVs al T^2 (c_j^{NICN}) obtenidas en base al concepto del NICN, τ_j^{NICN} mediante el procedimiento basado en datos simulados descrito en el capítulo anterior. Este consiste en calcular la c_j^{NICN} para estados anormales que no fueron ocasionados por la j -ésima variable, y estimar su función de distribución acumulada empírica. El τ_j^{NICN} se selecciona como el valor de c_j^{NICN} para el cual su probabilidad acumulada es $(1-\alpha)$, siendo α la probabilidad de identificación incorrecta. La extensión de este procedimiento a procesos batch no es directa, ya que deberían realizarse una gran cantidad de simulaciones para cada instante de tiempo, lo cual demandaría un costo computacional excesivo y podría tornarse una alternativa inviable.

Con el fin de aislar las variables sospechosas para procesos batch se recurre a la teoría de agrupamientos o clusters. En esta tesis se propone concentrar las CVs en dos regiones, de

manera tal que aquellas que indican el estado anómalo se encuentren en un cluster. La división de las CVs en dos clusters se realiza utilizando un procedimiento de agrupamiento jerárquico simple. La aplicación de la metodología propuesta no implica realizar suposición alguna.

Los procedimientos de agrupamientos o clustering han sido aplicados en una amplia gama de áreas de la investigación tales como biología, botánica, medicina, psicología, geografía, procesamiento de imágenes, etc., (Everitt y col. 2011), incluso se han presentado aportes en el ámbito de la detección de situaciones anómalas (Maestri y col. 2010). Sin embargo no se ha reportado su utilización para determinar el conjunto de variables sospechosas dadas las CVs al estadístico cuando éste supera el valor crítico.

El objetivo del análisis de clusters es agrupar muestras dentro de un grupo homogéneo de datos. Este se caracteriza porque sus miembros se encuentran cercanos unos de otros, pero al mismo tiempo están distantes de otros grupos (Mardia y col., 1979).

El clustering jerárquico es un método descriptivo que centra su análisis en la distancia o una medida de similitud que existe entre cada uno de los pobladores del sistema. Dicho método puede ejecutarse mediante un procedimiento aglomerativo, u otro de tipo disociativo. Los métodos aglomerativos consideran a cada poblador como un cluster, los cuales se van agrupando a partir de un criterio de distancia o similitud, hasta que todos los pobladores formen parte de un mismo grupo. Por otro lado, los métodos disociativos aplican el procedimiento inverso al anterior; parten del sistema completo y llegan a cada uno de los pobladores.

Un ejemplo de un método aglomerativo se muestra en la Figura 4.5. En esta se consideran 6 muestras denominadas con las primeras seis letras del abecedario. Las muestras B y E forman el primer cluster ya que se encuentran cercanas entre sí, de la misma forma las

muestras A y F forman el cluster AF. La muestra C está más próxima al cluster BE que al AF, por lo que forma el grupo BEC. Luego los grupos BEC y AF se encuentran más cercanos entre sí que a la muestra D, por lo tanto se genera el grupo BECAF. El último agrupamiento posible es el que se forma adjuntando D al grupo BECAF formando BECAFD.

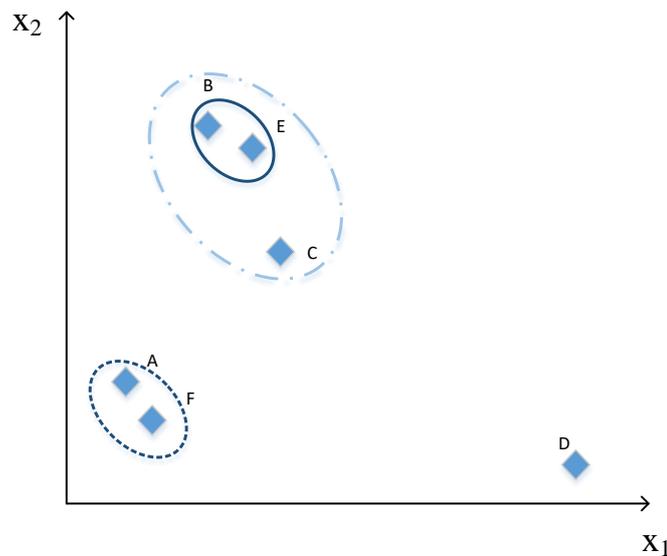


Figura 4.5: Ejemplo de agrupamientos aglomerativos (clusters)

Los métodos jerárquicos aglomerativos permiten construir un árbol de clasificación conocido como dendrograma a partir de las distancias entre las muestras consideradas. El objetivo principal del dendrograma es mostrar esquemáticamente las agrupaciones que cada individuo puede lograr. El dendrograma correspondiente a las muestras representadas en la Figura 4.5 se muestra en la Figura 4.6.

También es posible dividir todas las muestras en un número determinado de clusters, nc . Si se decide separar las muestras en nc grupos, éstos quedan determinados trazando una recta horizontal tal que corta nc líneas verticales del dendrograma. Si en el ejemplo anterior, se dividen las muestras en dos clusters, éstos quedan determinados trazando la recta horizontal que corte a dos líneas verticales del gráfico, tal como indica la Figura 4.6. De esta manera

quedan formados dos conjuntos. Uno contiene las muestras (BECAF) y el otro incluye la muestra D.

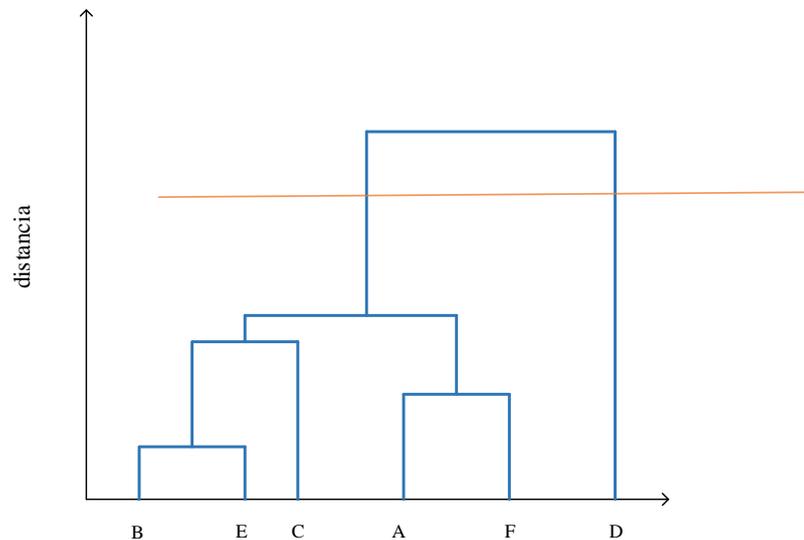


Figura 4.6: Dendrograma

Existen varias medidas de similitud, las cuales son aplicables dependiendo del requerimiento de la agrupación. Las medidas más comunes de similitud son:

- Similitud máxima o distancia mínima
- Similitud mínima o distancia máxima
- Métodos basados en promedios
- Métodos basados en centroides
- Método de Ward

En esta tesis se propone calcular las CVs al estadístico en función del alejamiento de la observación con respecto a una situación en control, es decir, las CVs se evalúan en términos de una distancia tal como se explicó anteriormente. Una vez que se calculan los elementos del vector de CVs, se considera dividirlos en dos grupos. Uno que contenga las CVs pequeñas, que representan una variabilidad normal del proceso, y otro que reúna las más grandes, que

están asociadas al desarrollo de la situación anormal. Para ello, se forma el dendrograma siguiendo el criterio de similitud máxima entre las CVs y se separan las CVs en dos grupos.

4.3 Implementación de la Estrategia de Monitoreo

Los pasos de la técnica propuesta correspondiente a las etapas fuera de línea y en línea se detallan a continuación:

4.3.1 Etapa I

- a. Se ordenan los datos obtenidos de la PR en una matriz tridimensional \underline{Z}
- b. Se centran y escalan cada una de las columnas de \underline{Z} para obtener \underline{X}
- c. Se calcula el estadístico $T_{i,k}^2$ asociado a la k -ésima observación del i -ésimo batch, y luego se utiliza el procedimiento KDE con el fin de obtener los valores críticos para cada instante de tiempo, $T_{C,k}^2$

4.3.2 Etapa II

- a. Durante la realización de una nueva corrida del batch, cada elemento del vector observación obtenido en el intervalo de monitoreo k , \mathbf{z}_k , se estandariza de la siguiente manera:

$$x_{k,j} = \frac{(z_{k,j} - \bar{z}_{k,j})}{\sigma_{k,j}}, \quad (4.8)$$

donde $z_{k,j}$ es el valor medido de la j -ésima variable en el instante de observación k -ésimo, y $\bar{z}_{k,j}$ y $\sigma_{k,j}$ representan la media y el desvío estándar de la j -ésima columna de \underline{Z} respectivamente.

- b. El valor del estadístico T_k^2 para la nueva observación estandarizada se calcula como sigue:

$$T_k^2 = \mathbf{x}_k^T \mathbf{R}_k^{-1} \mathbf{x}_k. \quad (4.9)$$

- c. El valor del estadístico calculado mediante la Ec. (4.9) se compara con el valor crítico correspondiente al intervalo de muestreo k , $T_{C,k}^2$. Si el estadístico supera el valor crítico durante tres intervalos consecutivos (k , $k-1$ y $k-2$), entonces se declara el estado fuera de control.
- d. Cuando se declara la existencia de un evento anormal, se realiza la identificación de las mediciones que revelan dicho estado. Para tal fin, se calcula en primera instancia las coordenadas del NICN, mediante la resolución del problema de optimización representado por la Ec. (4.6). Luego se evalúa el vector de CVs al estadístico T^2 , \mathbf{c}_k^{NICN} , empleando la Ec. (4.7).
- e. Se aplica la estrategia de clustering jerárquico aglomerativo estableciendo que $nc=2$. De esta manera las CVs más pequeñas, que son la mayoría, se agrupan en un cluster, mientras que las restantes, que corresponden a las variables que revelan la falla, se reúnen en el otro cluster. Se utiliza el método de clustering jerárquico disponible en el paquete Matlab.

4.4 Caso de Estudio

Se considera como ejemplo de aplicación la operación de un reactor batch no isotérmico, en el que se produce una reacción en fase líquida. El diagrama de flujo del sistema se representa en la Figura4.7. El sistema se compone de un reactor batch, con una camisa de refrigeración, en el cual el reactivo A produce el producto P mediante el modelo que se presenta a continuación:



$$\frac{dN_A}{dt} = -r_A V = -k_{\infty} e^{\left(\frac{-E_{act}}{RT}\right)} N_A^2, \quad (4.11)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{(N_A \times N_P) cp} \times (Q_{ext} + r_A \times \Delta H_{Rx} \times V), \quad (4.12)$$

$$Q_{ext} = F_{ref} cp_{ref} \left\{ (T_{refin} - T) \left[1 - e^{\left(\frac{UA}{F_{ref} cp_{ref}} \right)} \right] \right\}. \quad (4.13)$$

siendo: N_A y N_P los moles de reactivo y producto, respectivamente; r_A la velocidad de reacción y Q_{ext} indica el calor que recibe el fluido refrigerante. Los parámetros y constantes del sistema se definen en la Tabla 4.1. La reacción es exotérmica y se lleva a cabo durante un período de una hora. El sistema se muestrea a intervalos de 36s, por lo tanto se dispone de 100 vectores de observación para cada corrida del batch. Cada vector comprende: la composición del producto (C_P), temperatura del reactor (T), caudal de fluido refrigerante (F_{ref}), y las temperaturas de entrada (T_{refin}) y de salida del mismo fluido (T_{refout}), tal como se indica a continuación:

$$\mathbf{z} = [C_P \quad T \quad F_{ref} \quad T_{refin} \quad T_{refout}]. \quad (4.14)$$

Tabla 4.1: Parámetros y constantes del ejemplo de aplicación batch

Parámetro	Valor	Descripción
cp	120	Capacidad calorífica (J/mol K) igual para A y B
cp_{ref}	150	Capacidad calorífica del refrigerante (J/mol K)
UA	75000	Coefficiente de intercambio de calor (J/K)
R	8.314	Constante universal de los gases (J/mol K)
ΔH_{Rx}	-15000	Calor de reacción (J/mol)
E_{act}	13900.4	Energía de activación (J/mol)
k_{∞}	40	Factor pre-exponencial de la ecuación de Arrhenius (mol ⁻¹ hr ⁻¹)
V	500	Volumen del reactor (Litros)

La PR se forma con los resultados de 100 simulaciones de la operación del batch en condiciones normales, a las cuales se les adiciona un ruido aleatorio, es decir $\underline{Z} \in \mathbb{R}^{100 \times 5 \times 100}$.

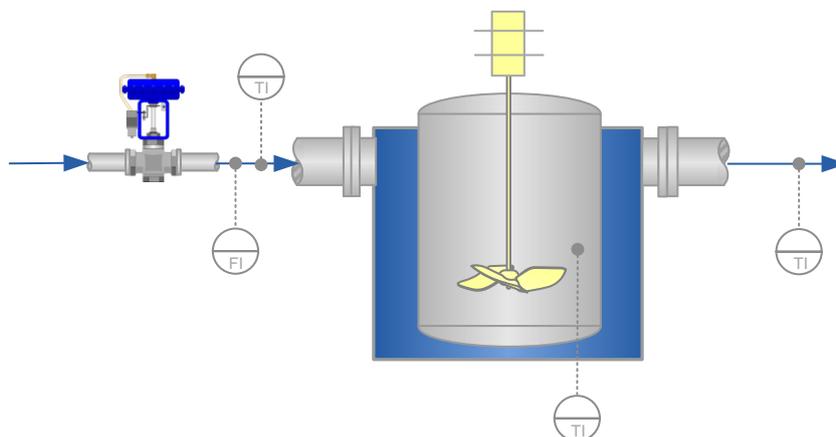


Figura 4.7: Diagrama de flujo del ejemplo de aplicación batch

Con el fin de evaluar y comparar estrategias de identificación de variables sospechosas, se simularon 144 eventos anormales considerando diferentes tipos, magnitudes y direcciones de fallas, además se adoptaron distintos tiempos de inicio de las mismas. Todas estas condiciones se resumen en la Tabla 4.2.

Tabla 4.2: Conjunto de fallas simuladas

Conjunto de Fallas	Variable Objetivo	Tipo de Falla	Magnitud †	Tiempo de inicio (min)	Cantidad de fallas
1	C_A	CI	$\pm 5, \pm 10, \pm 15, \pm 20$	0	8
2	T_0	CI	$\pm 5, \pm 10, \pm 15, \pm 20$	0	8
3	F_{ref}	E	$\pm 5, \pm 10, \pm 15, \pm 20$	0, 25, 50, 75	32
4	T_{refin}	E	$\pm 5, \pm 10, \pm 15, \pm 20$	0, 25, 50, 75	32
5	F_{ref}	R	$\pm 5, \pm 10, \pm 15, \pm 20$	0, 25, 50, 75	32
6	T_{refin}	R	$\pm 5, \pm 10, \pm 15, \pm 20$	0, 25, 50, 75	32

† Valores en porcentajes de valor de diseño excepto para las temperaturas que se consideran \pm grados con respecto a la simulación

Los dos primeros conjuntos de fallas simulan apartamientos de las condiciones iniciales (CIn) del batch con respecto a las especificadas en su receta (Tabla 4.3). Los restantes

eventos anormales comprenden cambios tipo escalón (E) y rampa (R) en F_{ref} y T_{refin} . Para las fallas tipo R, se consideró que los valores perturbados de las variables se mantienen hasta el final de la operación; en cambio para las fallas tipo E, dichos valores retornan al nominal.

Tabla 4.3: Receta del batch

Variable	Valor	Descripción
C_{P0}	0	Concentración inicial del producto P (moles/L)
C_{A0}	10	Concentración inicial del reactivo A (moles/L)
F_{ref}	1000	Flujo de entrada de refrigerante (mol/hr)
T_{refin}	353	Temperatura de entrada del refrigerante (K)
T_0	373	Temperatura inicial del reactor (K)

4.5 Resultados y Discusiones

En este capítulo la metodología NICNBP se compara exclusivamente con la estrategia OSSBP (Original Space Strategy – Batch Processes), propuesta por Alvarez y col. (2010), debido a que ésta presentó un mejor desempeño para la fase de identificación que el obtenido con las técnicas derivadas del PCA tradicional, para procesos batch similares al del caso de estudio.

Para los procedimientos de comparación estadística es esencial establecer una base de comparación justa. En tal sentido se verifica que tanto NICNBP como OSSBP trabajan en el espacio de las VOs, por lo cual aplican el T^2 con el fin de monitorear el proceso. Además ambas metodologías calculan el $T_{C,k}^2$ empleando la técnica KDE. Por lo tanto, seleccionando el mismo nivel de significado para el test de hipótesis que determina la existencia de eventos anormales ($\alpha=0.05$), las diferencias en el comportamiento entre los métodos NICNBP y OSSBP se atribuyen exclusivamente a la técnica de identificación que aplican.

Para cuantificar la capacidad de identificación de variables sospechosas de una metodología, se definen los siguientes índices de desempeño:

Número de Identificaciones Precisas (PI): todas las observaciones mediante las cuales se revela la falla se indican como sospechosas.

Número de Identificaciones Ambiguas (AI): todas las observaciones mediante las cuales se revela la falla, o un subconjunto de ellas, se reportan como variables sospechosas junto con otras mediciones.

Número de Identificaciones Incorrectas (II): ninguna observación del conjunto de mediciones que revelan la falla se indica como sospechosa.

Número de Identificaciones Vacías (VI): ninguna variable se señala como sospechosa.

Tabla 4.4: Índices de desempeño para identificación

	Tipo de Falla	OSSBP	NICNBP
PI(%)	Global	53,7	69,4
	Escalón	42,4	67,8
	Rampa	67,8	76,3
	CIn	43,8	50,0
AI(%)	Global	41,0	25,4
	Escalón	57,6	30,5
	Rampa	20,3	15,3
	CIn	56,3	43,8
II(%)	Global	5,2	5,2
	Escalón	0,0	1,7
	Rampa	11,9	8,5
	CI	0,0	6,3
VI(%)	Global	0,0	0,0
	Escalón	0,0	0,0
	Rampa	0,0	0,0
	CIn	0,0	0,0

En la Tabla 4.4 se presentan los índices de desempeño para cada tipo de falla y el global para cada estrategia. Estos últimos destacan la propuesta NICNBP, ya que ésta proporciona el mayor PI y el menor AI. Dichos índices difieren en un 15% para este caso de estudio. Además se obtienen valores similares para el II y VI.

Para las fallas tipo E, tanto el índice PI como el AI muestran una diferencia significativa en favor de la metodología NICNBP, del orden del 25%.

La diferencia entre los índices PI y AI disminuyen cuando se consideran las fallas tipo R, pero se mantiene la tendencia a favor del método NICNBP. Estas son del orden de 8% y 5%, respectivamente. Igual comportamiento se evidencia para el índice II, con una diferencia de un 2 % aproximadamente.

Para las fallas en las CIns, la metodología NICNBP supera a la OSSBP en un 6% y en un 12% para el PI y el AI, respectivamente.

Por otro lado, la estrategia OSSBP no presenta observaciones sin identificar, esto es, el índice VI para todos los tipos de fallas muestra valores nulos. Para la metodología NICNBP, este índice es siempre nulo.

4.6 Conclusiones

En este capítulo se presenta una nueva estrategia para el monitoreo estadístico de procesos batch caracterizados por la existencia de una matriz de correlación bien condicionada en cada intervalo de muestreo. Esta técnica utiliza un solo estadístico (T^2) para las etapas de detección e identificación. La identificación del conjunto de observaciones que señalan una falla se realiza calculando el NICN de la observación, y evaluando las contribuciones de las variables a la situación fuera de control mediante el cálculo de la

distancia entre el vector observación y el NICN. Se utiliza una técnica de agrupamiento jerárquico para seleccionar las mediciones sospechosas.

Los resultados muestran que la estrategia NICNBP puede ser aplicada exitosamente para el monitoreo de procesos batch. Por una parte, utiliza el mismo estadístico de detección empleado por OSSBP que ha presentado un buen desempeño en la detección de eventos anormales en los procesos batch analizados. Por la otra, NICNBP muestra un comportamiento superior con respecto a OSSBP en la etapa de identificación.

En la metodología OSSBP, el cálculo de la contribución de la j -ésima variable al T^2 se realiza considerando valores fijos para las demás mediciones e iguales a los observados. Esto puede originar que algunas CVs se magnifiquen. Esta situación se observa realizando un análisis sistemático de desempeño que comprenda muchos eventos anormales, como el presentado en este capítulo, en el cual se muestra que el número de identificaciones ambiguas aumenta en relación con el obtenido aplicando NICNBP.

La estrategia propuesta en esta tesis se basa en calcular el NICN, mediante la resolución de un problema de optimización, con el único requisito que éste se encuentre sobre el límite de la región de control estadístico del proceso; esto origina un cambio simultaneo de todas las variables.

Además del buen comportamiento de la metodología NICNBP como herramienta de identificación de fallas en procesos batch, la implementación industrial de la técnica resulta muy simple. A diferencia de técnicas existentes, no es necesario seleccionar de manera arbitraria límites para las CVs al estadístico, o aproximar la pdf de las mediciones o de las CVs en condiciones de operación normal, ni tampoco estimar la pdf empírica de las CVs en situaciones de falla por simulación lo que conlleva un alto costo computacional.

4.7 Referencias

- (1) Alvarez, C. R.; Brandolin, A.; Sánchez, M. C. Batch Process Monitoring in the Original Measurement's Space. *J. Process Control*. **2010**, *20*, 716-725.
- (2) Alvarez, R. Monitoreo Estadístico de Procesos Batch. Aplicaciones a Reactores de Polimerización. Tesis Doctoral, Universidad Nacional del Sur, 2009.
- (3) Cedeño, M. V.; Rodríguez, L. P.; Alvarez, C. R.; Sánchez, M. C. A New Approach to Estimate Variable Contributions to Hotelling's Statistic. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2012**, *118*, 120-126.
- (4) Everitt, B. S.; Landau, S.; Leese, M.; Stahl, D. *Cluster Analysis*, 5th ed. Wiley Series in Probability and Statistics: USA, 2011.
- (5) Gurden, S.; Westerhuis, J.; Bro, R.; Smilde, A. A Comparison of Multiway Regression and Scaling Methods. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2001**, 121-136
- (6) Lennox, B.; Montague, G. A.; Hiden, H. G.; Kornfeld, G.; Goulding, P. R. Process Monitoring of an Industrial Fed-Batch Fermentation. *Biotechnol Bioeng.* **2001**, *74* (2), 125-135.
- (7) Lohmöller, J. ; World, H. *Three-Mode Path Models with Latent Variables and Partial Least Squares (PLS) Parameter Estimation*. Proceedings of the European Meeting of the Psychometrics Society, Groningen, Netherlands, 1980.
- (8) Maestri, M.; Farall, A.; Groisman, P.; Cassanello, M.; Horowitz, G. A Robust Clustering Method for Detection of Abnormal Situations in a Process with Multiple Steady-State Operation Modes. *Comput Chem Eng.* **2010**, *34*, 223-231
- (9) Mardia, K. V.; Kent, J. T.; Bibby, J. M. *Multivariate Analysis*. Academic Press, 1979.
- (10) Nomikos, P.; MacGregor, J. F. Monitoring of Batch Process Using Multiway Principal Component Analysis. *AIChE J.* **1994**, *40* (8), 1361-1375.
- (11) Nomikos, P.; MacGregor, J. F. Multivariate SPC Charts for Monitoring Batch Processes. *Technometrics.* **1995**, *37* (1), 41-59.

-
- (12) Ramaker, H. J.; Van Sprang, E. N. M.; Westerhuis, J. A.; Smilde, A. K. Fault Detection Properties of Global, Local and Time Evolving Models for Batch Process Monitoring. *J Process Control*. **2005**, *15* (7): 799-805.
- (13) Smilde, A. K.; Bro, R.; Geladi, P. *Multi-Way Analysis with Applications in the Chemical Sciences*. John Wiley & Sons, Ltd. 2004.
- (14) Wold, S.; Geladi, P.; Esbensen, K.; Öhman, J. Multi-Way Principal Components-and PLS-Analysis. *J. Chemom.* **1987**, *1* (1), 41-56.
- (15) Wold, S.; Kettaneh, N.; Friden, H.; Holmberg, A. Modelling and Diagnostics of Batch Processes and Analogous Kinetic Experiments. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **1998**, *44*, 331-340.

Capítulo 5

5 DESCRIPCIÓN DEL CASO DE ESTUDIO.....123

5.1 Introducción123

5.2 Modelo Matemático del Proceso de Producción de Penicilina125

5.2.1 Crecimiento de Biomasa 127

5.2.2 Efecto y control del pH sobre el crecimiento de biomasa 128

5.2.3 Efecto y control de la Temperatura sobre el crecimiento de biomasa 130

5.2.4 Producción de Penicilina..... 132

5.2.5 Modelo de Sustrato 132

5.2.6 Cambios del Volumen del cultivo..... 133

5.2.7 Calor de Reacción 134

5.2.8 Evolución de CO₂ 135

5.2.9 Generación de la Población de Referencia 135

5.3 Referencias.....140

Página en Blanco

5 Descripción del Caso de Estudio

5.1 Introducción

A partir del Annual AIChE Meeting del año 1990 los investigadores dispusieron de un conjunto de desafiantes problemas industriales que les permitieron examinar y comparar el desempeño de nuevas metodologías de monitoreo y control de procesos. El caso de estudio más relevante corresponde al proceso continuo referido como Tennessee Eastman Plant-Wide Industrial Control Problem (Downs y Vogel., 1993), que ha sido utilizado en cientos de publicaciones académicas.

Con posterioridad, el interés científico e industrial de los procesos batch de naturaleza biológica motivó a Birol y col. (2002a) a compartir un ejemplo de aplicación sobre un proceso semibatch, desarrollado usando un modelo dinámico realista de la producción de penicilina. Su objetivo fue formular un modelo suficientemente detallado para ser usado con el fin de examinar nuevas metodologías de monitoreo, control y optimización, e implementar un algoritmo de simulación dinámica ad-hoc del proceso.

Desde su descubrimiento en 1928 por Alexander Fleming, pasando por la producción natural estimulada propuesta por Heatley y Moyer en 1941, hasta la obtención contemporánea de penicilinas sintéticas de alta especificidad, el principal objetivo de la industria fue obtener un producto con un alto contenido de los principios activos. Además, la disponibilidad de un modelo dinámico realista de fermentación de penicilina se ha perseguido desde inicios de los 70s. Con tal propósito, algunos investigadores (Constantinides y col., 1970; Birol y col., 2002b) consideraron modelos estructurados, los cuales tienen en cuenta la fisiología de la célula en el proceso productivo. Otros (Bajpai y Reuss, 1980; Nestaas y Wang, 1983) concentraron toda la información intracelular en un término de biomasa y

obtuvieron modelos más simples, debido a que no es necesario disponer de información sobre la actividad celular.

Birol y col. (2002a) realizaron una recopilación de trabajos bibliográficos de modelos no estructurados, e introdujeron en ellos los efectos del pH, temperatura, velocidad de aireación, potencia del agitador y flujo de sustrato sobre la producción de penicilina. El modelo resultante fue validado mediante los datos experimentales obtenidos por Pirt y Righoletto (1967) y Metz y col. (1981).

En el modelo propuesto por Birol y col. (2002a), la incorporación del azúcar necesario para el crecimiento de los microorganismos puede realizarse mediante alimentaciones secuenciales en determinados instantes de tiempo dentro del mismo batch, o en forma continua tomando naturaleza de un proceso semi-batch.

El modelo presentado define diferentes políticas de alimentación de azúcar con el objetivo de optimizar la producción de penicilina:

- a) Velocidad de alimentación controlada: el objetivo es lograr un patrón de crecimiento pre-establecido controlando la velocidad de crecimiento de biomasa en un valor previamente determinado durante la fase de crecimiento y en otro durante la fase de producción.
- b) Velocidad constante de alimentación: con el fin de obtener un patrón de crecimiento decidido de antemano.
- c) Aumento o disminución en forma de rampa: con el fin de mantener una concentración constante de azúcar en el sistema durante la fase de producción.

Diversos autores han utilizado recientemente este modelo de fermentación batch–semibatch con el objetivo de evaluar estrategias de MSPC (Yao y Wang, 2015; Lv y col. 2014) y estrategias de optimización dinámica (Mandur y Budman, 2014).

En este capítulo se describe en detalle el modelo de producción de penicilina propuesto por Birol y col. (2002a), dado que se lo emplea como caso de estudio para: examinar el desempeño de la estrategia de MSPC propuesta en esta tesis y compararlo con el obtenido usando metodologías existentes. Además se explica el procedimiento de simulación empleado para generar la Población de Referencia (PR).

5.2 Modelo Matemático del Proceso de Producción de Penicilina

En la Figura 5.1 se muestra un diagrama general de las variables de entrada y salida del modelo del proceso de producción de penicilina semi-batch.

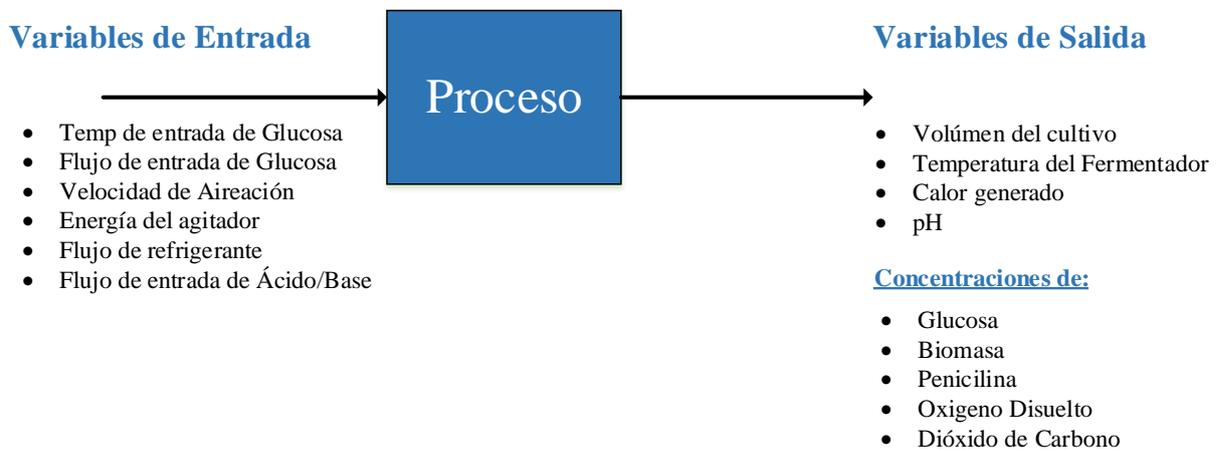


Figura 5.1: Estructura Entrada-Salida del modelo de fermentación

En la Tabla 5.1 se presentan los valores de las condiciones iniciales del sistema, los parámetros cinéticos y variables del modelo, y los parámetros de los controladores.

Tabla 5.1: Condiciones iniciales, parámetros cinéticos y de los controladores

Variable	Valor
<i>Condiciones Iniciales</i>	
Concentración de biomasa: $C_x (g/l)$	0.1
Concentración de CO ₂ : $C_{CO_2} (mmol/l)$	0.5
Concentración de iones hidrógenos: $C_{[H^+]} (mol/l)$	$10^{-5.1}$

Concentración de oxígeno disuelto: C_o (C_o^* en saturación) (g/l)	1.16
Concentración de penicilina: C_p (g/l)	0
Concentración de sustrato: C_s (g/l)	15
Generación de calor: Q_{rxn} (cal)	0
Temperatura: T (K)	297
Volumen del cultivo: V (l)	100
Parámetros cinéticos y variables	
Coeficiente de mantenimiento de oxígeno: m_o (h^{-1})	0.467
Coeficiente de mantenimiento de sustrato: m_x (h^{-1})	0.014
Coeficiente de transferencia de calor del líquido de Enfriamiento/Calentamiento: a (cal / $h^\circ C$)	1000
Concentración de entrada de sustrato: $C_{F_{SIN}}$ (g/l)	600
Constante de Arrhenius de crecimiento: k_g	7×10^3
Constante de Arrhenius para muerte de células: k_d	10^{33}
Constante de inhibición para la formación de producto: K_I (g/l)	0.10
Constante de inhibición: K_p (g/l)	0.0002
Constante de limitación de oxígeno: K_{OX} , K_{Op} (sin limitación)	0
Constante de limitación de oxígeno: K_{OX} , K_{Op} (con limitación)	2×10^{-2} , 5×10^{-5}
Constante de proporcionalidad: α_7 ($mol [H^+] / g$ biomasa)	10^{-5}
Constante de rendimiento: $Y_{x/s}$ (g biomasa/g sustrato)	0.45
Constante de rendimiento: $Y_{x/o}$ (g biomasa/g oxígeno)	0.04
Constante de rendimiento: $Y_{p/s}$ (g penicilina/g sustrato)	0.90
Constante de rendimiento: $Y_{p/o}$ (g penicilina/g oxígeno)	0.20
Constante de saturación: K_x (g/l)	0.15
Constante de velocidad de hidrolisis de penicilina: K (h^{-1})	0.04
Constante en K_{la} : α_4, α_5	70, 0.4
Constante en la generación de calor: r_{q2} (cal / g biomasa h)	1.6783×10^{-4}
Constante en K_{loss} : α_6 (h^{-1})	2.5×10^{-4}
Constante que relaciona CO ₂ con el crecimiento: α_1 (mmol CO ₂ /g biomasa)	0.143
Constante que relaciona CO ₂ con la energía de mantenimiento: α_2 (mmol CO ₂ /g biomasa h)	4×10^{-7}
Constante que relaciona CO ₂ con la producción de penicilina: α_3 (mmol CO ₂ /l h)	10^{-4}

Constante: K_1 (mol/l)	10^{-10}
Constante: K_2 (mol/l)	7×10^{-5}
Constante: p	3
Constante: b	0.60
Densidad \times Capacidad calorífica del líquido refrigerante: $\rho_{ref} c_{pref}$ ($1/l \text{ } ^\circ C$)	1/2000
Densidad \times Capacidad calorífica del medio: ρc_p ($1/l \text{ } ^\circ C$)	1/1500
Energía de activación de crecimiento: E_g (cal/mol)	5100
Energía de activación para muerte de células: E_d (cal/mol)	50000
Flujo de agua de enfriamiento: F_c (l/h)	
Flujo de entrada de sustrato: F_{SIN} (l/h)	
Rendimiento de generación de calor: r_{q1} ($cal/g \text{ biomasa}$)	60
Temperatura de entrada de sustrato: T_{SIN} (K)	298
Velocidad específica de producción de penicilina: μ_p (h^{-1})	0.005
Velocidad máxima de crecimiento específico: μ_x (h^{-1})	0.092
Parámetros de los controladores (PID)	
pH: (<i>base</i>) $K_c, \tau_1(h), \tau_d(h)$	$8 \times 10^{-4}, 4.2, 0.2625$
pH: (<i>ácido</i>) $K_c, \tau_1(h), \tau_d(h)$	$1 \times 10^{-4}, 8.4, 0.125$
Temperatura: (<i>Enfriamiento</i>) $K_c, \tau_1(h), \tau_d(h)$	70, 0.5, 1.6
Temperatura: (<i>Calentamiento</i>) $K_c, \tau_1(h), \tau_d(h)$	5, 0.8, 0.05

A continuación se detalla el modelo del crecimiento de biomasa, así como los efectos que producen las variaciones de pH y temperatura y sus respectivos criterios de control. Además se presentan las ecuaciones usadas para modelar la producción de penicilina, el uso del sustrato, el cambio de volumen, el calor de reacción y la evolución del dióxido de carbono.

5.2.1 Crecimiento de Biomasa

El crecimiento de biomasa depende principalmente de la glucosa (como fuente de carbono) y del oxígeno, ambos se consideran sustratos en la producción de penicilina. También es sabido que una gran cantidad de biomasa, por sí misma, inhibe el crecimiento. Se

asume que la dependencia del crecimiento específico de biomasa en relación con los sustratos carbono y oxígeno sigue una cinética de Contois, la cual considera el efecto de la inhibición.

El crecimiento de biomasa se considera descrito de la siguiente manera:

$$\frac{dC_x}{dt} = \mu_G C_x - \frac{C_x}{V} \frac{dV}{dt} \quad , \quad (5.1)$$

donde la velocidad de crecimiento específico (μ_G) se representa mediante la siguiente ecuación:

$$\mu_G = \mu_x \frac{C_s}{(K_x C_x + C_s)} \frac{C_o}{(K_{ox} C_x + C_o)} \quad . \quad (5.2)$$

Con el fin de considerar las variables del sistema, tales como la temperatura y el pH, se debe modificar μ_G en las ecuaciones de crecimiento de biomasa según indica la Ec. (5.3), puesto que dichas variables juegan un rol importante en la generación de biomasa:

$$\mu_G = \left[\frac{\mu_x}{1 + \left[\frac{K_1}{C_{[H^+]}} \right] + \left[\frac{C_{[H^+]}}{K_2} \right]} \right] \frac{C_s}{K_x C_x + C_s} \frac{C_o}{K_{ox} C_x + C_o} \mu_{Arrhenius} \quad , \quad (5.3)$$

donde μ_G representa, en este caso, la velocidad de crecimiento específica global, y sigue una ley tipo Arrhenius ante variaciones de temperatura en la cual se tienen en cuenta el crecimiento y muerte de las células. Esto se representa en la Ec. (5.4)

$$\mu_{Arrhenius} = \left[k_g \exp\left(-\frac{E_g}{RT}\right) \right] - \left[k_d \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \right] \quad . \quad (5.4)$$

5.2.2 Efecto y control del pH sobre el crecimiento de biomasa

La concentración de los iones de hidrógeno en solución, $C_{[H^+]}$, es un factor de inhibición de la velocidad de crecimiento específico de la biomasa. Para considerarlo se introduce un

término de inhibición típico en la expresión de dicha velocidad. Si bien esta modificación no modela de manera apropiada la relación entre la actividad de las células y el pH, se ha observado un buen ajuste de la misma con los datos experimentales publicados por Nielsen y Villadsen (1994). El término adicional es el siguiente:

$$\mu_G \propto f \left[\frac{\mu_X}{1 + \left[K_1 / C_{[H^+]} \right] + \left[C_{[H^+]} / K_2 \right]} \right], \quad (5.5)$$

Los valores de K_1 y K_2 se eligen de manera tal que se encuentren dentro de los rangos de valores típicos presentados en la literatura (Nielsen y Villadsen, 1994).

Durante la fermentación el objetivo se centra en mantener el pH del cultivo constante, lo cual se logra con la adición de NH_4OH . El aumento de la concentración de biomasa produce un aumento en la acidez de cultivo, y por lo tanto la adición del NH_4OH debe aumentarse. La $C_{[H^+]}$ se relaciona con la formación de biomasa de la siguiente manera:

$$\frac{dC_{[H^+]}}{dt} = \alpha_7 \left(\mu_G C_X - \frac{FC_X}{V} \right) + \left[\frac{-B + \sqrt{(B^2 + 4 \times 10^{-14})}}{2} + C_{[H^+]} \right] \frac{1}{\Delta t}, \quad (5.6)$$

donde B se representa mediante la Ec (5.7)

$$B = \frac{\left(10^{-14} / C_{[H^+]} - C_{[H^+]} \right) V - C_{a/b} (F_a + F_b) \Delta t}{V + (F_a + F_b) \Delta t}. \quad (5.7)$$

siendo F_a y F_b los flujos de ácido y base, respectivamente, en unidades de l/h y la concentración de ambas soluciones se asumen iguales a $C_{a/b} = 3 M$. Se debe notar que las variaciones de pH producidas por la presencia de penicilina o por la acción de algún otro

metabolito no se encuentran cuantificadas en la Ec. (5.6) debido a la falta de datos experimentales.

Cuando se controla el pH, la $C_{[H^+]}$ se calcula teniendo en cuenta la disociación agua-ácido/base al mismo tiempo que el hidrógeno producido por la biomasa. La constante de proporcionalidad α_7 , se estima igual a $10^{-5} \text{ mol}[H^+]/\text{gbiomasa}$, tomando como base los datos experimentales del trabajo realizado Mou y Cooney (1983).

El pH se mantiene controlado en un valor constante e igual a 5 mediante la adición de una solución concentrada de ácido o base cuando sea necesario. Se elige un controlador proporcional-integral-derivativo (PID) para controlar cada corriente de ácido o base. Los parámetros de los controladores se presentan en la Tabla 5.1. La solución de ácido se añade al cultivo exclusivamente cuando el pH supera un valor de 0.05 expresado en desvío.

5.2.3 Efecto y control de la Temperatura sobre el crecimiento de biomasa

La velocidad de crecimiento específico tiene una notable dependencia de la temperatura. Se puede observar que dicha velocidad aumenta con la temperatura hasta un cierto valor máximo, a partir del cual se produce una inversión ocasionada por la alta velocidad de muerte de los microorganismos. Estos efectos se consideran mediante una expresión cinética tipo Arrhenius:

$$\mu_G \propto \left\{ \left[k_g \exp\left(-\frac{E_g}{RT}\right) \right] - \left[k_d \exp\left(-\frac{E_d}{RT}\right) \right] \right\} . \quad (5.8)$$

donde k_g y E_g son la constante y la Energía de activación del crecimiento, y k_d y E_d son las correspondientes a la muerte de los microorganismos. Los valores de estas constantes se presentan en la Tabla 5.1 y consideran un crecimiento de células hasta una temperatura de

35°C, a partir de la cual se experimenta un rápido decrecimiento en la concentración de biomasa.

En este tipo de procesos pequeñas variaciones en las condiciones de operación producen cambios importantes en la calidad del producto final. El sistema analizado presenta una alta sensibilidad ante la temperatura del cultivo, es por esto que, se debe controlar de manera estricta la temperatura y sus posibles variaciones. La temperatura del cultivo propuesta en la literatura es 25 °C (Atkinson y Mavituna, 1991).

Se elige un controlador PID diseñado para controlar la temperatura del sistema mediante la manipulación del flujo de agua caliente o fría (Marlin, 1995). En la Figura 5.2 se muestran los parámetros del controlador PID que afecta al agua fría, y su correspondiente respuesta en la operación a lazo cerrado del sistema. Los parámetros del controlador que afecta al agua caliente se muestran en la Tabla 5.1.

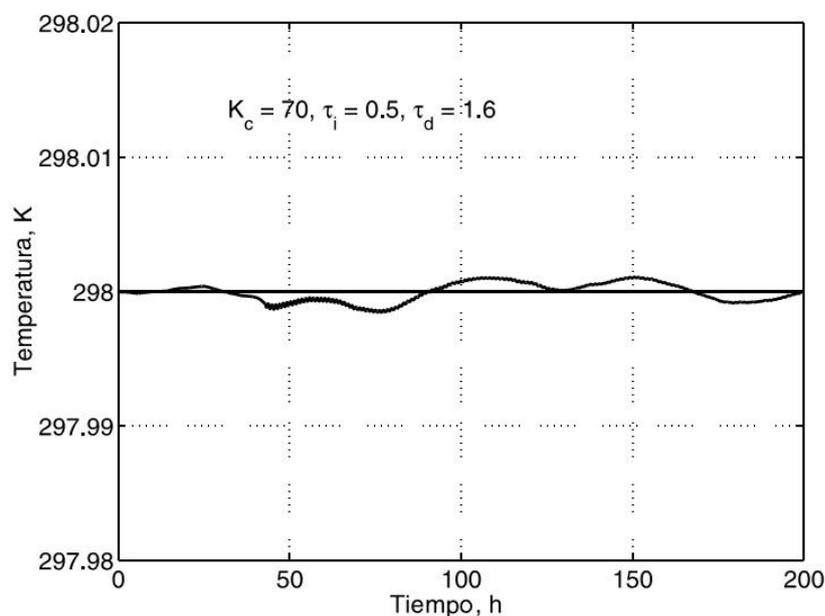


Figura 5.2: Controlador PID del agua fría y su respuesta en operación a lazo cerrado

5.2.4 Producción de Penicilina

La producción de penicilina se encuentra descrita mediante la cinética de producto no asociado al crecimiento. La hidrólisis de la penicilina también se considera en la expresión de velocidad (Bajpai y Reuss, 1980)

$$\frac{dC_P}{dt} = \mu_{PP}C_X - KC_P - \frac{C_P}{V} \frac{dV}{dt} \quad , \quad (5.9)$$

donde μ_{PP} representa la velocidad específica de producción de penicilina, definida por la siguiente ecuación:

$$\mu_{PP} = \mu_p \frac{C_S}{\left(K_P + C_S + \frac{C_S^2}{K_I} \right)} \frac{C_O^P}{K_{OP}C_X + C_O^P} \quad . \quad (5.10)$$

La cinética de inhibición mediante sustrato para la producción de penicilina fue originalmente formulada por Bajpai y Reuss (1980), los cuales representaron exitosamente los datos experimentales.

5.2.5 Modelo de Sustrato

Se asume que la utilización de sustrato se origina en el crecimiento de la biomasa, en el crecimiento del producto con conversión constante, y en los requerimientos de mantenimiento de los microorganismos de la manera sugerida por Bajpai y Reuss (1980), que modelan la situación para la glucosa y el oxígeno disuelta según muestran las Ecs. (5.11) y (5.12), respectivamente.

$$\frac{dC_S}{dt} = -\frac{\mu_G}{Y_{X/S}} C_X - \frac{\mu_{PP}}{Y_{P/S}} C_P - m_X C_X + \frac{FC_{F_{SIN}}}{V} - \frac{C_S}{V} \frac{dC_S}{dt} \quad , \quad (5.11)$$

$$\frac{dC_O}{dt} = -\frac{\mu_G}{Y_{X/O}} C_X - \frac{\mu_{PP}}{Y_{P/O}} C_P - m_O C_X + K_{la} (C_O^* - C_O) - \frac{C_O}{V} \frac{dC_S}{dt} \quad . \quad (5.12)$$

donde el coeficiente de transferencia de masa global K_{la} se modela en función de la potencia del agitador P_w y del flujo de oxígeno F_O (Bailey y Ollis, 1986).

$$K_{la} = \alpha_4 \sqrt{F_O} \left(\frac{P_w}{V} \right)^{\alpha_5} \quad (5.13)$$

Los valores de α_4 y α_5 se incluyen en la Tabla 5.1. Ambos se eligen de manera tal que la dependencia de la concentración de penicilina con K_{la} sea la predicha por Bajpai y Reuss (1980).

5.2.6 Cambios del Volumen del cultivo

Debido a que el sistema es un proceso de fermentación semi-batch, el modelo debe considerar la variación del volumen del cultivo, el cual se encuentra representado en la ecuación (5.14).

$$\frac{dV}{dt} = F_{SIN} + F_{a/b} - F_{loss} \quad (5.14)$$

Una de las corrientes que ingresan en el sistema es aquella que provee el sustrato de glucosa F_{SIN} , por otro lado se considera la adición de la solución ácido-base que controla el pH en el término $F_{a/b}$, por último se toma en consideración aquellas cantidades de líquido que se evaporan durante la fermentación en el término F_{loss} . Para los procesos de escala industrial, el término de evaporación es más significativo que aquel que considera la adición de la solución ácido-base.

El modelo del flujo de evaporación se formula en función de la temperatura y del volumen del cultivo de la siguiente manera:

$$F_{loss} = V \alpha_6 \left(\exp \left(5 \left(\frac{T - T_0}{T_v - T_0} \right) \right) - 1 \right) \quad (5.15)$$

donde T_0 y T_v son las temperaturas de congelamiento y de ebullición del medio del cultivo, las cuales se asumen iguales a las temperaturas de congelamiento y ebullición del agua. La constante 5 representa una evaporación que tiende a infinito en el punto de ebullición. La constante α_6 se muestra en la Tabla 5.1, y corresponde a una evaporación conocida a la temperatura de operación (25°C).

5.2.7 Calor de Reacción

Si se desprecian todas las fuentes de calor con excepción del generado por las reacciones microbiológicas, el calor volumétrico se representa en la ecuación (5.16).

$$\frac{dQ_{rxn}}{dt} = r_{q1} \frac{dC_x}{dt} V + r_{q2} C_x V \quad , \quad (5.16)$$

donde r_{q1} se asume constante y puede considerarse como un coeficiente de conversión (Nielsen y Villadsen, 1994) en la etapa de crecimiento. Cuando el proceso se encuentra en la fase de síntesis de producto, la generación de biomasa es mínima, pero incluso en esta etapa el calor generado en el cultivo es significativo debido principalmente a las actividades de mantenimiento de los metabolitos, lo cual se encuentra cuantificado por el último término de la ecuación (5.16).

El balance de energía para el proceso se formula de la siguiente manera:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F_{SIN}}{C_{F_{SIN}}} (T_f - T) + \frac{1}{V \rho c_p} \times \left[Q_{rxn} - \frac{a F_c^{b+1}}{F_c + (a F_c^b / 2 \rho_{ref} c_{pref})} \right] \quad , \quad (5.17)$$

Las constantes a, b, las densidades y capacidades caloríficas se muestran en la Tabla 5.1.

5.2.8 Evolución de CO₂

Es imperante incorporar variables fácilmente medibles que aporten información del sistema y permitan predecir otras variables importantes del proceso. En este sentido la concentración de CO₂ puede utilizarse para predecir el contenido de biomasa con alta exactitud:

$$\frac{dC_{CO_2}}{dt} = \alpha_1 \frac{dC_X}{dt} + \alpha_2 C_X + \alpha_3 \quad . \quad (5.18)$$

Las constantes α_1 , α_2 , α_3 , se eligen de manera tal que los perfiles de concentración de CO₂ sean los predichos por Montague y col. (1986). Sus valores se encuentran tabulados en la Tabla 5.1. El comportamiento de CO₂ es similar al que presenta la demanda de oxígeno para la producción de penicilina cuando se usa la glucosa como sustrato.

5.2.9 Generación de la Población de Referencia

El modelo no estructurado del sistema de fermentación semi-batch descrito previamente posee un total de 9 ecuaciones diferenciales y 7 ecuaciones algebraicas, sin contar aquellas que modelan los controladores. El diagrama de flujo del proceso se detalla en la Figura 5.3. Este comprende un reactor de cultivo con un serpentín para intercambio de calor. Tanto el pH como la temperatura del cultivo se controlan automáticamente utilizando controladores PID. El modelo tiene la capacidad de manipular cuatro variables en cualquier momento de la operación, mientras que las restantes pueden modificarse solamente al inicio de la simulación.

Este caso de estudio cuenta con dos etapas de operación secuenciales con diferentes modos operativos. La primera opera como un proceso batch y dura 45 horas. La segunda lo hace como un proceso semi-batch durante 355 horas.

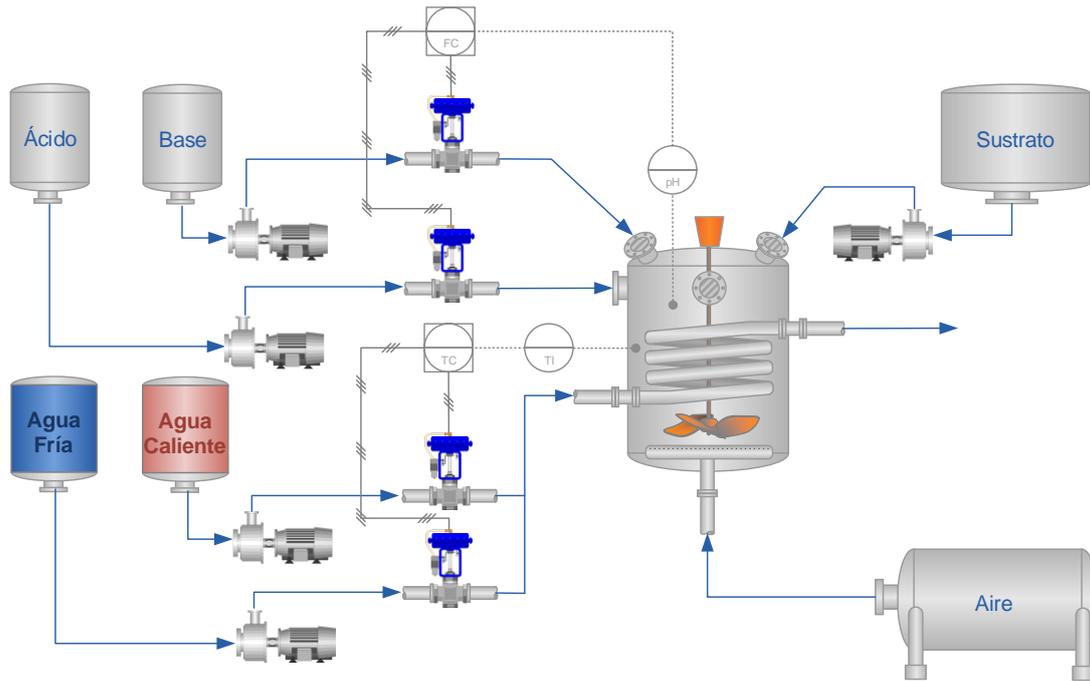


Figura 5.3. Diagrama de flujo del proceso de producción de penicilina.

Se miden 10 variables durante la primera etapa, mientras que para la descripción de la segunda etapa se consideran 13 observaciones, las cuales se presentan en la Tabla 5.2.

Tabla 5.2: Descripción de las observaciones del sistema semi-batch

Variable		Descripción	Comentarios
Etapas1	Etapas2		
1	1	Velocidad de Aireación	Etapas 1 y 2 / variable de entrada
2	2	Potencia del Agitador	Etapas 1 y 2 / variable de entrada
0	3	Caudal de entrada de sustrato	Etapas 2 / variable de entrada
3	4	Temperatura entrada de sustrato	Etapas 1 y 2 / variable de entrada
4	5	Concentración de sustrato	Etapas 1 y 2
5	6	Concentración de oxígeno disuelto	Etapas 1 y 2
6	7	Concentración de Biomasa	Etapas 1 y 2
0	8	Concentración de Penicilina	Etapas 2
7	9	Volumen	Etapas 1 y 2
8	10	Dióxido de carbono	Etapas 1 y 2
9	11	pH	Etapas 1 y 2
10	12	Temperatura	Etapas 1 y 2
0	13	Caudal de agua de enfriamiento	Etapas 2

En las Figuras 5.4 a 5.7 se muestra la trayectoria nominal de cada una de las variables seleccionadas para representar el modelo empírico de fermentación.

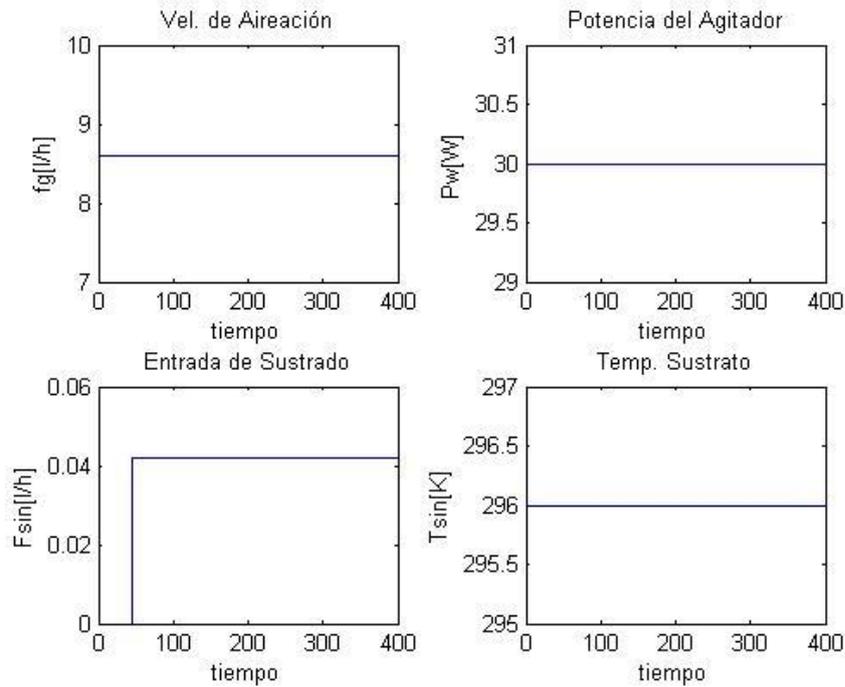


Figura 5.4: Trayectoria nominal de las Variables 1 a la 4

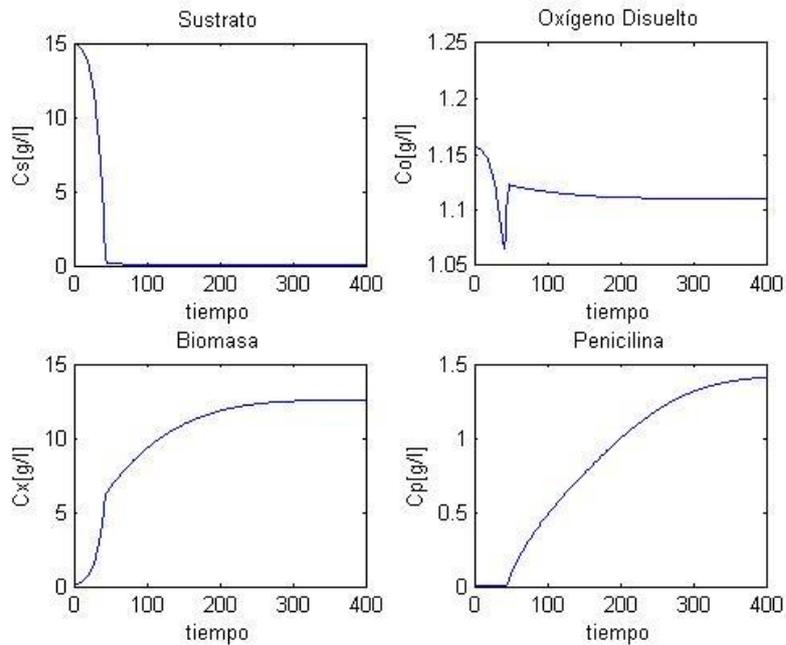


Figura 5.5: Trayectoria nominal de las Variables 5 a la 8

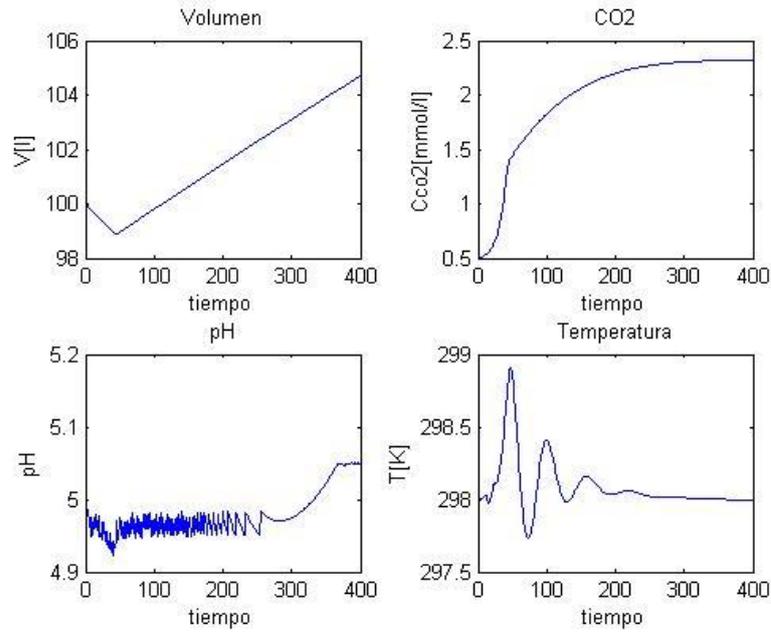


Figura 5.6: Trayectoria nominal de las Variables 9 a la 12

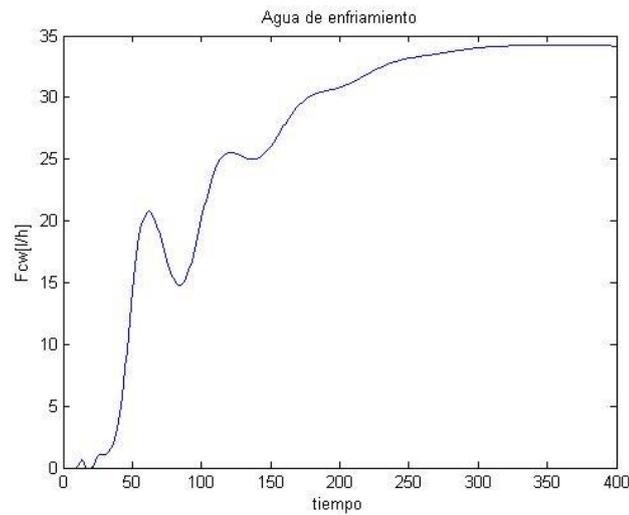


Figura 5.7: Trayectoria nominal de la Variable 13

Quando se desarrolla un conjunto de simulaciones aleatorias de la operación normal del proceso, se obtiene un subconjunto reducido de batches que deben eliminarse debido a que no representan adecuadamente dicha operación. La elección de las corridas representativas de la operación normal se realiza mediante el concepto de validación cruzada o Leave One Out.

Para este trabajo de tesis se simularon 200 batches con condiciones iniciales aleatorias dentro de los intervalos de confianza de la receta del proceso. De estos se eliminaron 19 batches que no poseían las características requeridas como para pertenecer a la PR. Por lo tanto, está se forma con 181 simulaciones. Se asume que las observaciones se registran cada hora durante 400 horas de operación. Luego, a los valores simulados de las variables, correspondientes a los intervalos de muestreo, se les agrega un ruido aleatorio con el propósito de asumirlos como observaciones reales del proceso.

5.3 Referencias

- (1) Atkinson, B.; Mavituna, F. *Biochemical Engineering and Biotechnology*. Handbook, Stockton Press: New York, 1991.
- (2) Bailey, J. E.; Ollis, D. F. *Biochemical Engineering Fundamentals*. McGraw Hill: New York, 1986.
- (3) Bajpai, R.; Reuss, M. A Mechanistic Model for Penicillin Production. *J. Chem. Technol. Biotechnol.* **1980**, *30*, 330-344.
- (4) Birol, G.; Ündey, C.; Cinar A. A Modular Simulation Package for Fed-Batch Fermentation: Penicillin Production. *Comput. Chem. Eng.* **2002a**, *26*, 1553-1565.
- (5) Birol, G.; Ündey, C.; Parulekar, S. J.; Cinar A. A Morphologically Structured Model for Penicillin Production. *Biotechnol. Bioeng.* **2002b**, *77* (5), 538-552.
- (6) Constantinides, A.; Spencer, J.; Gaden, E. J. Optimization of Batch Fermentation Processes. I. Development of Mathematical Models for Batch Penicillin Fermentations. *Biotechnol. Bioeng.* **1970**, *12*, 803-830.
- (7) Downs, J.; Vogel, E. A Plant-Wide Industrial Control Problem. *Comput. Chem. Eng.* **1993**, *13*, 21-33.
- (8) Lv, Z.; Yan, X.; Jiang, Q. Batch Process Monitoring Based on Just-In-Time Learning and Multiple-Subspace Principal Component Analysis. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2014**, *137*, 128-139.
- (9) Mandur, J S.; Budman, H. M. Robust Optimization of Chemical Processes using Bayesian Description of Parametric Uncertainty. *J. Process Control.* **2014**, *24* (2), 422-430.
- (10) Marlin T. *Process Control*. McGraw Hill: New York, 1995.
- (11) Metz, B.; Bruijin, E.; van Suijdam, J. Method for Quantitative Representation of the Morphology of Molds. *Biotechnol. Bioeng.* **1981**, *23*, 149 -162
- (12) Montague, G.; Morris, A.; Wright, A.; Aynsley, M.; Ward, A. Growth Monitoring and Control through Computer-Aided On-line Mass Balancing in Fed-Batch Penicillin Fermentation. *Can. J Chem. Eng.* **1986**, *64*, 567-580.

- (13) Mou, D.; Cooney, C. Modeling and Adaptive Control of Fed-Batch Penicillin Production. *Biotechnol. Bioeng.* **1983**, *25*, 225-255.
- (14) Nestaas, E.; Wang, D. Computer Control of the Penicillin Fermentation Using the Filtration Probe in Conjunction with a Structured Process Model. *Biotechnology and Bioengineering.* **1983**, *25*, 781-796.
- (15) Nielsen, J.; Villadsen, J. *Bioreaction Engineering Principles*. Plenum Press: New York, 1994.
- (16) Pirt, S.; Righoletto, R. Effect of Growth Rate on the Synthesis of Penicillin by *Penicillium Chrysogenum* in Batch and Chemostat Cultures. *Appl. Microbiol.* **1967**, *15*, 1284-1290.
- (17) Yao, M.; Wang, H. On-line Monitoring of Batch Processes Using Generalized Additive Kernel Principal Component Analysis. *J. Process Control.* **2015**, *28*, 56-72.

Capítulo 6

6	<i>Resultados y Discusión</i>	144
6.1	Generación de Datos	144
6.1.1	Variaciones en las condiciones iniciales.....	145
6.1.2	Cambios en la Potencia del Agitador.....	145
6.1.3	Cambios en la Velocidad de Aireación.....	146
6.1.4	Cambios en el caudal de entrada del sustrato	147
6.2	Base de Comparación entre distintas técnicas	148
6.3	Comparación entre OSSBP, NICNBP, KPCA-RBC y KPCA-CN	151
6.4	Conclusiones	169
6.5	Referencias	171

Página en Blanco

6 Resultados y Discusión

En este capítulo se presentan los resultados de la aplicación de la estrategia de monitoreo descrita en el Capítulo 4 para el seguimiento de la operación del proceso de producción de penicilina detallado en el Capítulo 5.

Además se compara el desempeño del enfoque propuesto en esta tesis para identificación de variables sospechosas con el obtenido mediante la aplicación de otras técnicas existentes. Dentro de aquellas que monitorean el proceso empleando directamente los valores de las Variables Originales (VOs), se selecciona el procedimiento Original Space Strategy Batch Processes (OSSBP), formulado por Alvarez y col. (2010). En relación con las técnicas que utilizan Variables Latentes (VLs), se eligen dos variantes de la metodología Análisis de Componentes Principales Kernel (KPCA). Una de ellas utiliza la Contribución de la Variable basada en la Reconstrucción (RBC) durante la fase de identificación (Alcala y Qin, 2010), y se la denota como KPCA-RBC. La otra emplea la Contribución Normalizada (CN) con el valor crítico del estadístico (Godoy y col., 2014) y se la indica como KPCA-CN.

6.1 Generación de Datos

El modelo de producción de penicilina descrito en el capítulo anterior se utilizó para realizar simulaciones del proceso en diferentes condiciones operativas normales. Se agregó ruido aleatorio a los resultados de las simulaciones. De esta manera se emuló un registro histórico de datos de corridas que produjeron un producto en especificación.

En primera instancia se simularon 200 lotes. El pretratamiento del conjunto de datos generados se realizó mediante el procedimiento de validación cruzada, y se seleccionaron 181 batches para formar la Población de Referencia (PR). Tal como se indicó en la Tabla 5.2, durante la primera y segunda fases del proceso se utilizan 10 y 13 observaciones para

monitorearlo, respectivamente. Para cada intervalo de muestreo se calculó la media y la varianza de cada observación en la PR.

Además se simularon 444 situaciones en las cuales el comportamiento del proceso resultó anormal. Se consideraron fallas de distinta naturaleza. Para cada tipo de falla se contemplaron diferentes magnitudes de la desviación, y diversos tiempos de ocurrencia y duración. Las fallas se identificaron mediante una numeración creciente desde 1 hasta 444 y se las agrupa de la siguiente manera.

6.1.1 Variaciones en las condiciones iniciales

Los sistemas biológicos son muy sensibles a cambios en los valores iniciales de las variables que afectan el crecimiento de la biomasa. En tal sentido se simularon modificaciones de las condiciones iniciales (CIn) de las variables 5, 7, 11 y 12 de la Tabla 5.2 con respecto a las indicadas en la receta del batch. Dichas observaciones corresponden a la concentración del sustrato, la concentración de biomasa, el pH y la temperatura del reactor. Las fallas se introducen de a una por vez en las variables mencionadas. La Tabla 6.1 contiene los valores de las perturbaciones simuladas para cada una de las 24 fallas (6 fallas por cada variable). Los cambios para la temperatura del bioreactor se expresan en grados centígrados.

Tabla 6.1: Clasificación de fallas de Condición Inicial

Fallas	Variable	1ra	2da	3ra	4ta	5ta	6ta
1 – 6	Concentración de sustrato (5)	-5%	5%	-10%	10%	-15%	15%
7 – 12	Temperatura (12)	-0,5°	0,5°	-2°	2°	-5°	5°
13 – 18	pH (11)	-5%	5%	-10%	10%	-15%	15%
19 – 24	Concentración de Biomasa (7)	-5%	5%	-10%	10%	-15%	15%

6.1.2 Cambios en la Potencia del Agitador

Los cambios en la potencia del agitador (variable 2 de la Tabla 5.2) producen modificaciones en la velocidad de reacción. Si el sistema se mantiene completamente agitado,

la velocidad de reacción es homogénea dado que cada célula de biomasa tiene, en promedio, la misma cantidad de sustrato a su alrededor.

Inicialmente se simularon 72 cambios tipo escalón (E) en la potencia del agitador, que comprenden el rango de muestras [25-96] de la población de fallas. La Tabla 6.2 muestra la magnitud, tiempo de inicio y duración de los distintos escalones considerados. Posteriormente se simularon 72 cambios tipo rampa (R) en la misma variable, que comprenden el rango de muestras [235-306] de la población de fallas. Las Rs se caracterizan porque el valor de la variable cuando la R finaliza se mantiene constante hasta el final de la corrida. Los datos para el conjunto de Rs simuladas también se incorporan a la Tabla 6.2

Tabla 6.2: Cambios en la Potencia del Agitador

Variable Objetivo	Tipo de Falla	Magnitud (% del valor de diseño)	Tiempo de inicio (h)	Duración (h)	Cantidad de fallas
2	E	±5, ±10, ±20	0, 100, 200, 300	10, 50, 100	72
2	R	±5, ±10, ±20	0, 100, 200, 300	10, 50, 100	72

En este trabajo la pendiente del cambio en forma de R se evalúa en función del desvío máximo respecto del valor normal:

$$\text{pendiente} = \frac{\text{desvío máximo-valor normal}}{t_{\text{final}} - t_{\text{inicial}}} \tag{6.1}$$

donde t_{final} y t_{inicial} son los instantes final e inicial entre los cuales se simula la R.

6.1.3 Cambios en la Velocidad de Aireación

La velocidad de aireación corresponde a la variable 1 de la Tabla 5.2. Se simularon 144 cambios de la variable con respecto a las condiciones operativas normales, de los cuales 72 son Es y otros tantos son Rs. En la Tabla 6.3 se detallan los cambios simulados. Las primeras 72 fallas corresponden al rango de muestras [97-168] de la población de fallas, y las restantes al rango [305-378].

Tabla 6.3: Cambios en la velocidad de Aireación

Variable Objetivo	Tipo de Falla	Magnitud (% del valor de diseño)	Tiempo de inicio (h)	Duración (h)	Cantidad de fallas
1	E	±5, ±10, ±20	0, 100, 200, 300	10, 50, 100	72
1	R	±5, ±10, ±20	0, 100, 200, 300	10, 50, 100	72

6.1.4 Cambios en el caudal de entrada del sustrato

La disponibilidad de sustrato es indispensable para la producción de penicilina en la segunda fase del proceso. Durante ésta, la operación del proceso cambia a semibatch. El caudal de sustrato que ingresa en la Etapa 2 se identifica como variable número 3 en la Tabla 5.2.

Debido a que las fallas en dicho caudal tienen incidencia recién a partir del intervalo de muestreo 45, se simulan sólo 66 fallas tipo E (rango de muestras [169-234] de la población de fallas) y otras tantas tipo R (rango de muestras [379-444] de la misma población). En la Tabla 6.4 se muestran los cambios simulados.

Tabla 6.4: Cambios en el caudal de entrada del sustrato

Variable Objetivo	Tipo de Falla	Magnitud (% del valor de diseño)	Tiempo de inicio (h)	Duración (h)	Cantidad de fallas
3	E	±5, ±10, ±20	45, 145, 245, 345	10, 50, 100	66
3	R	±5, ±10, ±20	45, 145, 245, 345	10, 50, 100	66

En la Tabla 6.5 se resumen todas las desviaciones simuladas de las variables con respecto a las condiciones operativas normales para este ejemplo de aplicación.

A los valores de las variables obtenidos por simulación del proceso en condiciones de operación anormales, se les agregó un ruido aleatorio a fin de emular un conjunto disponible de mediciones para casos de falla.

Tabla 6.5: Conjunto General de Fallas simuladas

Conjunto de Fallas	Variable Objetivo	Tipo de Falla	Magnitud (% del valor de diseño)	Tiempo de inicio (h)	Duración (h)	Cantidad de fallas
1	5, 7, 11	CI	$\pm 5, \pm 10, \pm 15$	0	-	18
2	12	CI	$\pm 0.5^\circ, \pm 2^\circ, \pm 5^\circ$	0	-	6
3	2	E	$\pm 5, \pm 10, \pm 20$	0, 100, 200, 300	10, 50, 100	72
4	1	E	$\pm 5, \pm 10, \pm 20$	0, 100, 200, 300	10, 50, 100	72
5	3	E	$\pm 5, \pm 10, \pm 20$	45, 145, 245, 345	10, 50, 100	66
6	2	R	$\pm 5, \pm 10, \pm 20$	0, 100, 200, 300	10, 50, 100	72
7	1	R	$\pm 5, \pm 10, \pm 20$	0, 100, 200, 300	10, 50, 100	72
8	3	R	$\pm 5, \pm 10, \pm 20$	45, 145, 245, 345	10, 50, 100	66

6.2 Base de Comparación entre distintas técnicas

A continuación se mencionan algunos puntos importantes a considerar para llevar a cabo una evaluación correcta del comportamiento de diferentes técnicas estadísticas.

a. Alarmas y alertas

Cada uno de los vectores observación del batch monitoreado se utiliza para realizar un test de hipótesis, que permite decidir sobre el estado de control estadístico del proceso. Si el valor del estadístico supera su límite crítico para una dada observación, entonces se produce una señal de alerta. En esta tesis se considera que si ocurren tres alertas sucesivas se declara una alarma, lo que indica que el batch está fuera de control.

b. Niveles de significación local y global

El nivel de significación utilizado en cada realización de un test de hipótesis se conoce como nivel de significación local (α_L) y es la probabilidad de cometer un error Tipo I. El nivel de significación global (α_G) cuando se realizan K tests sucesivos es la probabilidad de cometer al menos un error de Tipo I en alguno de los K test realizados. Existen varias formas de estimar el valor del α_L necesario para conseguir el α_G deseado.

Si se considera que las mediciones son independientes entre sí, es decir, que el hecho de tomar una observación del proceso no afecta a los valores de las siguientes, el ajuste de Bonferroni (Ramaker y Van Sprang, 2004) permite despejar el α_L de la siguiente expresión:

$$\alpha_G = 1 - (1 - \alpha_L)^{1/K}. \quad (6.2)$$

La aproximación más conocida para esta corrección es:

$$\alpha_G \approx \alpha_L K. \quad (6.3)$$

De la Ec. (6.3) se desprende que para disminuir la probabilidad global de Error Tipo I, los α_L deberán tomar valores muy conservativos.

Las particularidades de las metodologías utilizadas en las técnicas que aquí se estudian hacen que la determinación del α_L no resulte trivial. Ramaker y Van Sprang (2004) abordaron el problema de las mediciones sucesivas en el contexto del monitoreo de procesos batch. Sin embargo, algunos puntos críticos que dificultan la obtención del α_L no se contemplaron en ese estudio. El hecho de que una alarma se declara cuando tres observaciones sucesivas caen fuera de los límites reduce drásticamente la probabilidad de Error Tipo I. Además, una vez que se detecta una alarma, el batch se declara fuera de control haciendo innecesaria la evaluación de las observaciones futuras. Estos factores complican el tratamiento matemático para la determinación del α_L . Por ese motivo, en este trabajo de tesis se estimó el α_L utilizando el enfoque empírico que se explica a continuación (Alvarez y col., 2010).

Dado que el número de batches considerados no es muy grande ($I = 181$), el ajuste empírico de los valores del α_L para un $\alpha_G = 0,01$ puede arrojar valores mayores del 1%. Por esta razón, en este trabajo sólo se consideraron los límites correspondientes a $\alpha_G = 0,05$.

c. Número Promedio de Errores Tipo I (AVTI)

Las diferencias intrínsecas que existen entre las metodologías analizadas podrían ocasionar que las mismas presenten, de manera sistemática, valores distintos en sus tasas de falsas alarmas. Estas pueden estimarse en base a los resultados obtenidos cuando los batches que forman la PR se monitorean como si fuesen batches nuevos usando para ello el enfoque de validación cruzada. El Número Promedio de Errores Tipo I (AVTI) es una medida empírica de la tasa de falsas alarmas. Ramaker y col. (2005) presentan una formulación para estimar el AVTI, mediante la siguiente ecuación.

$$AVTI = \frac{\sum_{i=1}^I \tilde{\sigma}_i}{I} \times 100 \quad (6.4)$$

donde $\tilde{\sigma}_i$ es igual a uno si corresponde a un batch i fuera de control y cero de manera contraria.

Con el objetivo de establecer una base apropiada para la comparación entre las diferentes técnicas, se modificaron sus correspondientes α_L con el fin de lograr un valor del AVTI de aproximadamente 5 para todas ellas. Los valores que toma α_L para cada etapa del proceso, así como los valores de AVTI de cada estrategia se presentan a continuación:

Tabla 6.6: AVTI y α_L para todas las estrategias

	OSSBP	NICNBP	KPCA-RBC	KPCA-CN
AVTI	5,5	5,5	6,1	5,5
α_L	0,05/0,01	0,05/0,01	0,0001/0,01	0,05/0,035

En esta tesis se cuantifica la capacidad de detección de eventos anormales de una estrategias empleando los índices de desempeño definidos por Ramaker y Van Sprang (2004). Estos son los siguientes:

Número de Alarmas Perdidas (MA): considera las pruebas en las cuales la falla simulada no fue detectada.

Tiempo de Acción Luego de la Señal (AST): señala el tiempo de retardo entre el momento en que ocurre la falla y el momento en el cual se la detecta. Los resultados presentados para este índice corresponden a un valor de AST promedio, debido a las diferencias existentes entre las fallas simuladas.

Los índices empleados en la etapa de identificación son el Número de Identificaciones Precisas (PI), Ambiguas (AI), Incorrectas (II) y Vacías (VI). Los mismos ya se definieron en el Capítulo 4.

6.3 Comparación entre OSSBP, NICNBP, KPCA-RBC y KPCA-CN

En esta sección se presentan los resultados de la aplicación de la estrategia de monitoreo descrita en el Capítulo 4 para el seguimiento de la operación del proceso de producción de penicilina. También se compara, de manera sistemática, su capacidad de identificación de variables sospechosas en relación con la correspondiente a las técnicas OOSBP, KPCA-RBC y KPCA-CN.

Para las metodologías que emplean VLs, al igual que para OSSBP y NICNBP, se formularon modelos empíricos locales. El número de Componentes Principales (CPs) se fijó en un valor tal que permite una reconstrucción de la varianza total del sistema del 80% para cada intervalo de muestreo. Se utilizó el Estadístico Combinado (γ) para realizar el seguimiento de la operación del proceso en línea. El valor crítico de γ se calculó usando la metodología Kernel Density Estimation (KDE) para el método KPCA-CN, mientras que se consideró que sigue una distribución $g\chi^2(h)$ cuando se emplea la técnica KPCA-RBC. La función kernel elegida es un polinomio de grado 2, pues demostró ser adecuada para el caso de estudio analizado, tal como surge del trabajo de Lee y col. (2004).

En cuanto a la identificación de variables sospechosas, Alcalá y Qin (2010) no propusieron límites de control para las RBCs, e indicaron que debe realizarse una inspección visual de los gráficos de contribución. Dado que esto impide la determinación automática del conjunto de variables sospechosas, en esta tesis se propone, con el fin de realizar estudios comparativos de desempeño, seguir la técnica propuesta por Westerhuis y col. (2000) y empleada luego por Álvarez y col. (2010). Para la i -ésima muestra de la PR correspondiente al k -ésimo intervalo de muestreo, se calcula la RBC de la j -ésima variable ($RBC_{j,i}^k = f_{j,i}^2$) resolviendo iterativamente una ecuación no lineal. Luego se calcula la media y la varianza muestral de la RBC_j^k y su límite, $\tau_j^{RBC^k}$, de la siguiente manera:

$$\overline{c_j^{RBC^k}} = \frac{\sum_{i=1}^I RBC_{j,i}^k}{I} \quad , \quad (6.5)$$

$$\text{var}(RBC_j^k) = \frac{\sum_{i=1}^I \left(RBC_{j,i}^k - \overline{c_j^{RBC^k}} \right)^2}{I-1} \quad , \quad (6.6)$$

$$\tau_j^{RBC^k} = \overline{c_j^{RBC^k}} + 3\sqrt{\text{var}(RBC_j^k)}. \quad (6.7)$$

En esta tesis se considera que si el estadístico empleado en la fase de detección supera el valor crítico en el instante k -ésimo, las variables que muestran el comportamiento anormal son aquellas cuyas observaciones simuladas, estandarizadas empleando su media y varianza en la PR, superan el valor 3. Este criterio se basa en que una variable aleatoria independiente con una distribución de probabilidad aproximada a la normal estandarizada concentra el 99,7% de sus valores a 3 desvíos de distancia de su media. El mismo ha sido extensamente aplicado en la industria, como así también en trabajos científico, por ejemplo los presentados por Musulin y col. (2004) y Chiang y col. (2003). Existen otros razonamientos para determinar cuáles son las variables que se modifican como consecuencia de la ocurrencia de la falla, por ejemplo elegir un porcentaje de variación respecto de la trayectoria nominal del batch, pero ninguno considera la variabilidad intrínseca de la PR. Dado que para el caso de estudio se dispone de datos simulados de falla, la aplicación del citado criterio permite establecer un patrón de variables sospechosas para cada falla que se utiliza para luego contrastarlo con los resultados provistos por las técnicas de identificación comparadas.

Las cartas de control y los gráficos de contribución son las formas más comunes de presentar los resultados obtenidos en las etapas de detección e identificación, respectivamente. Sin embargo, dado el gran número de fallas simuladas y de técnicas analizadas, no resulta viable usar estas representaciones para cada falla propuesta. A los efectos ilustrativos, se presenta una carta de control y un gráfico de contribución para cada tipo de falla (CIn, E, R) y se analizan los resultados de cada estrategia.

Para las fallas estudiadas a continuación, todas las estrategias detectan una alarma en el mismo instante de muestreo, por lo tanto solamente se comparan sus destrezas en cuanto a la identificación de las variables que revelan el comportamiento anormal.

Para el primer tipo de fallas, se elige la número 11. Esta introduce un cambio negativo de 5 grados en la CIN de la temperatura del cultivo (variable 10). Se viola la estructura de correlación de la PR de manera significativa y en consecuencia, los estadísticos toman valores grandes. Las cartas de control se muestran en las Figuras 6.1 a 6.3

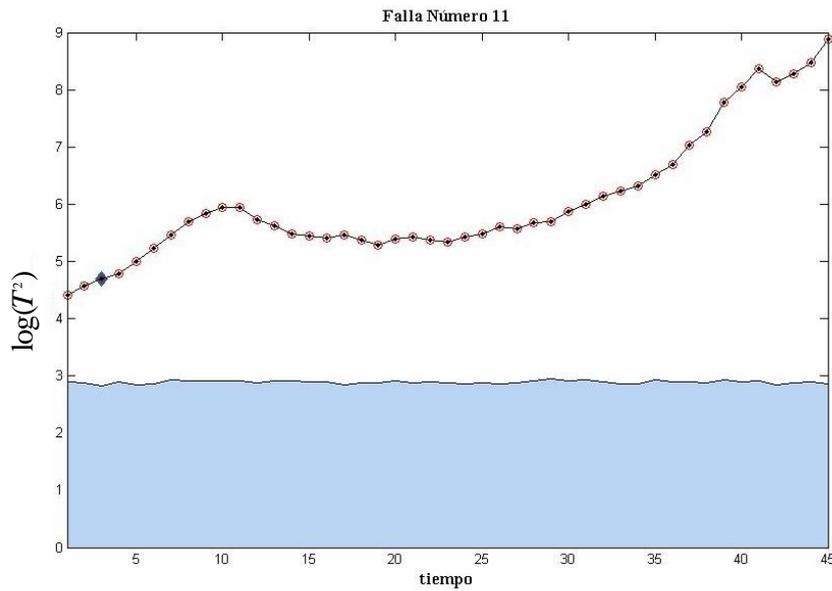


Figura 6.1: Carta de control del T^2 , Falla 11

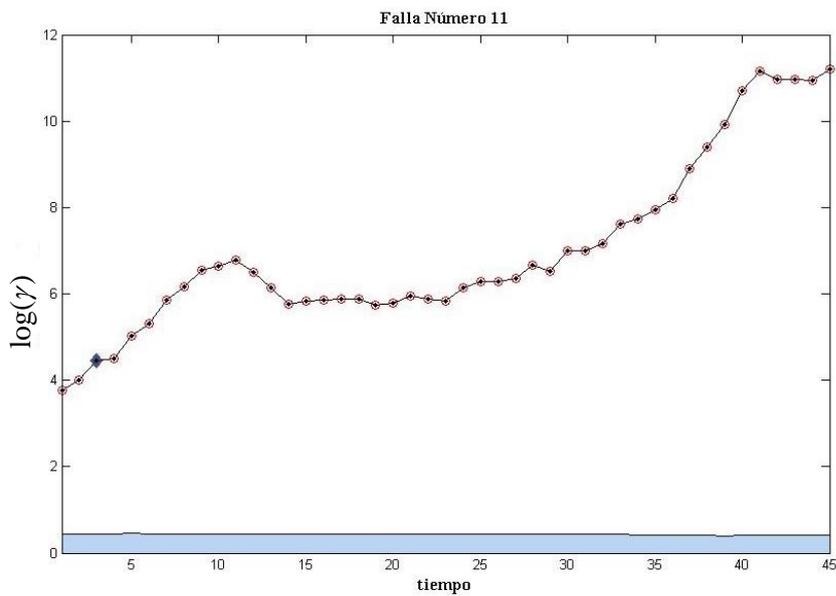


Figura 6.2: Carta de control del γ (KPCA-RBC), Falla 11

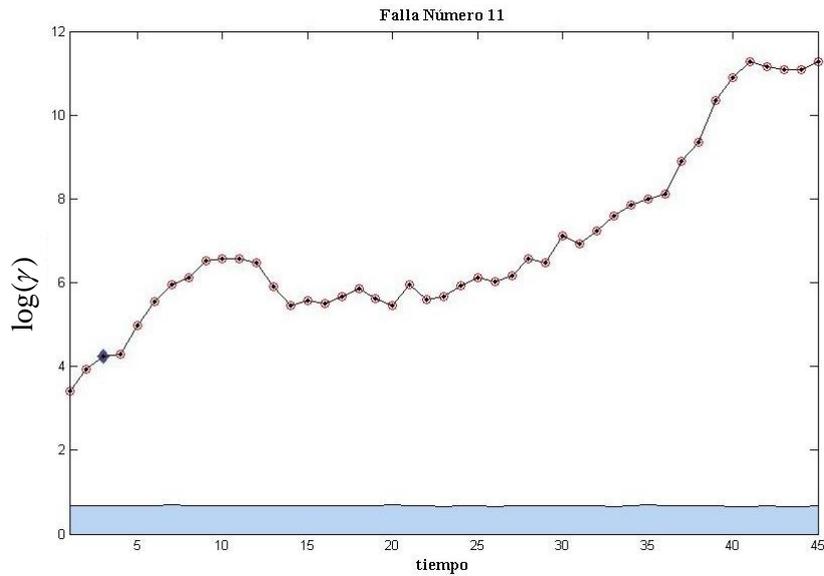


Figura 6.3: Carta de control del γ (KPCA-CN)

Un cambio grande de la temperatura del sistema (mayor a 5 grados centígrados) puede desarrollar alteraciones catastróficas en la estructura de la célula aumentando la muerte de las mismas, situación modelada con la ley de Arrhenius en el Capítulo 5. Esto produce: una disminución en la concentración de biomasa, un aumento en la concentración del sustrato y una disminución del oxígeno disuelto, respecto de la condición mostrada por la PR; por lo tanto la falla también puede revelarse por estas variables.

En el caso de la falla 11, la detección se realizó en el instante 3 del monitoreo (Etapa 1). Debido al funcionamiento del lazo de control, la perturbación no es lo suficientemente grande como para afectar a más de una variable. Los mayores porcentajes de variación con respecto a la trayectoria nominal simulada del batch corresponden a las variables 6 (concentración de biomasa) y 10 (temperatura del bioreactor), cuyos cambios porcentuales son 4,1% y 1,68% respectivamente. Sin embargo éstos no son representativos de la variabilidad del proceso contenida en la PR. Los valores estandarizados de dichas variables, teniendo en cuenta su media y varianza en la PR son -2,4 y -10, respectivamente. Siguiendo el criterio de

identificación empleado en este tesis, sólo la variable 10 revela la falla en ese intervalo de tiempo. Se considera que la variable 6 todavía está dentro de los límites normales.

A continuación se muestran los gráficos de las CVs para las estrategias comparadas.

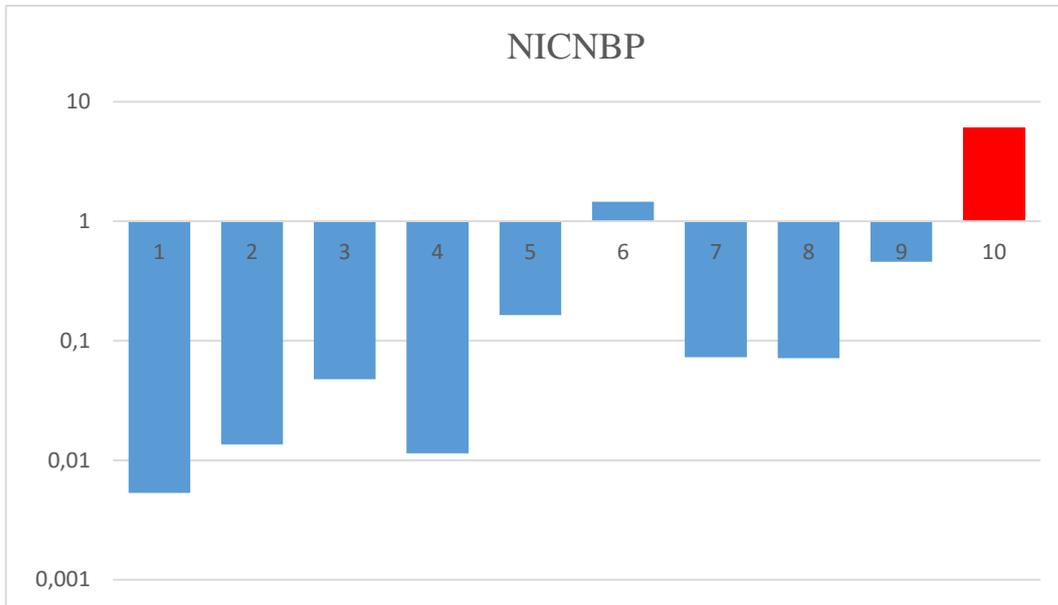


Figura 6.4: Contribuciones de la estrategia NICNBP, Falla 11

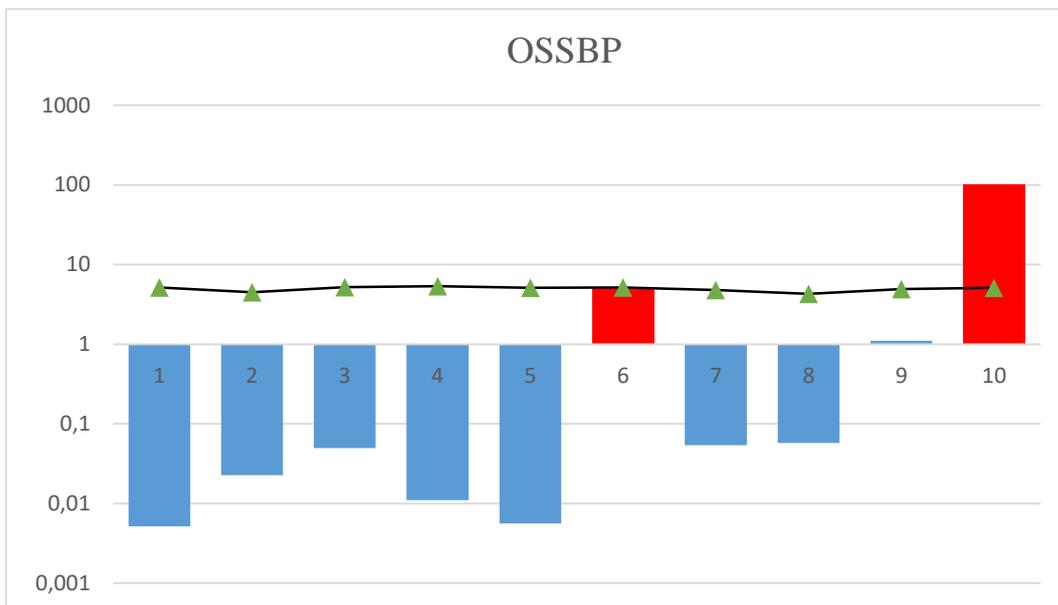


Figura 6.5: Contribuciones de la estrategia OSSBP, Falla 11

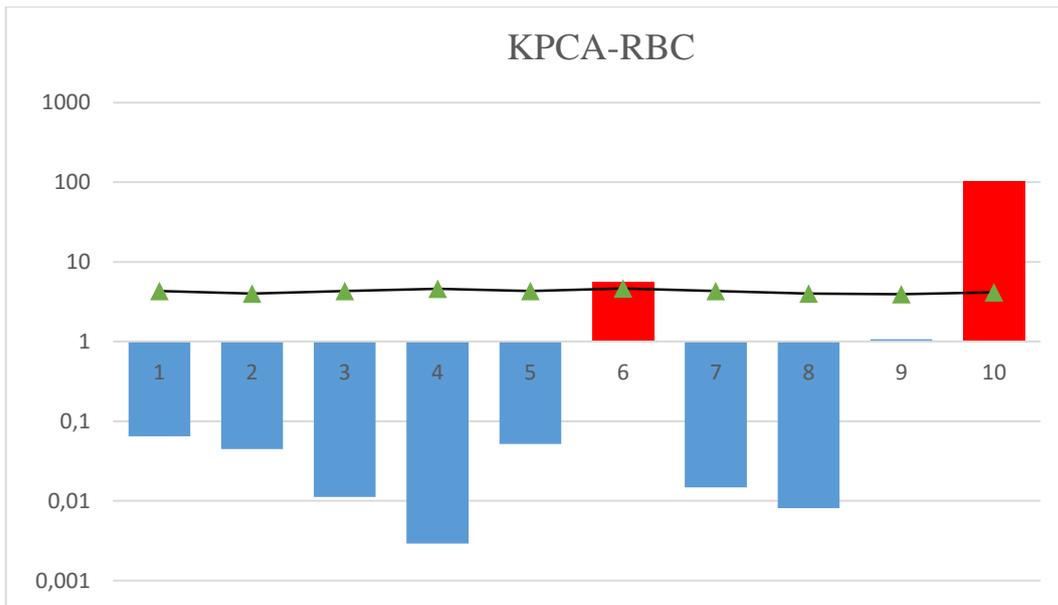


Figura 6.6: Contribuciones de la estrategia KPCA-RBC, Falla 11

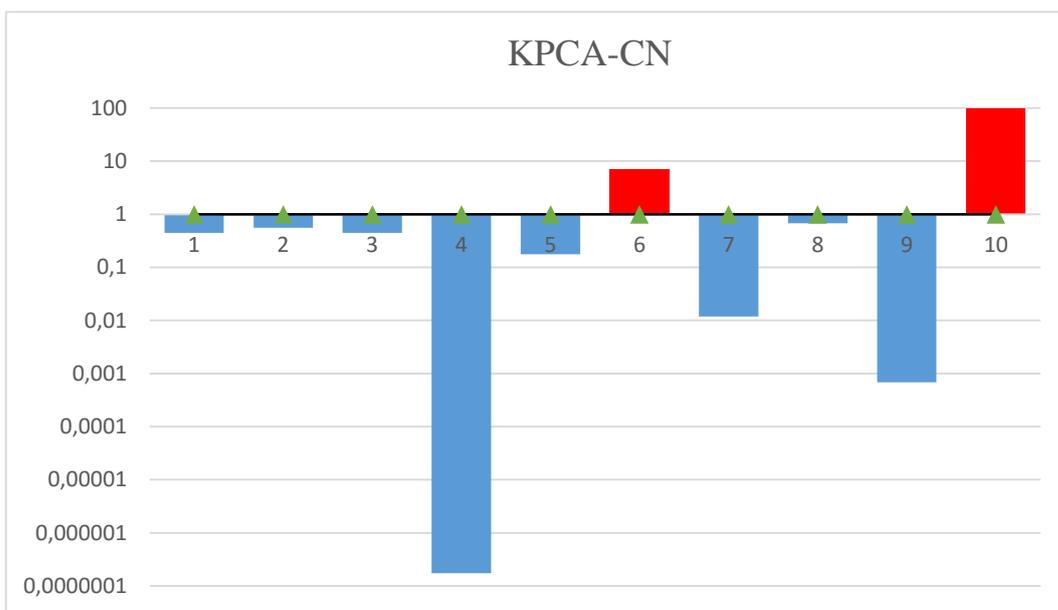


Figura 6.7: Contribuciones de la estrategia KPCA-CN, Falla 11

En los gráficos presentados se puede observar que la estrategia propuesta (NICNBP) señala como variable sospechosa exclusivamente a la variable 10, lo cual se corresponde con el criterio anteriormente señalado, esto es, se obtiene una identificación perfecta. Por otro

lado, se muestra que las estrategias restantes señalan también a la variable 6 como sospechosa, produciendo una identificación ambigua.

Para el conjunto de fallas tipo E se analiza la número 120. Este batch presenta un cambio escalón en el caudal de aireación (variable 1) en el instante de monitoreo $k=100$ (Etapa 2). Con respecto a la detección del evento anormal, todas las estrategias presentan una alarma en $k=103$. Las cartas de control para esta falla se muestran en las Figuras 6.8 a 6.10.

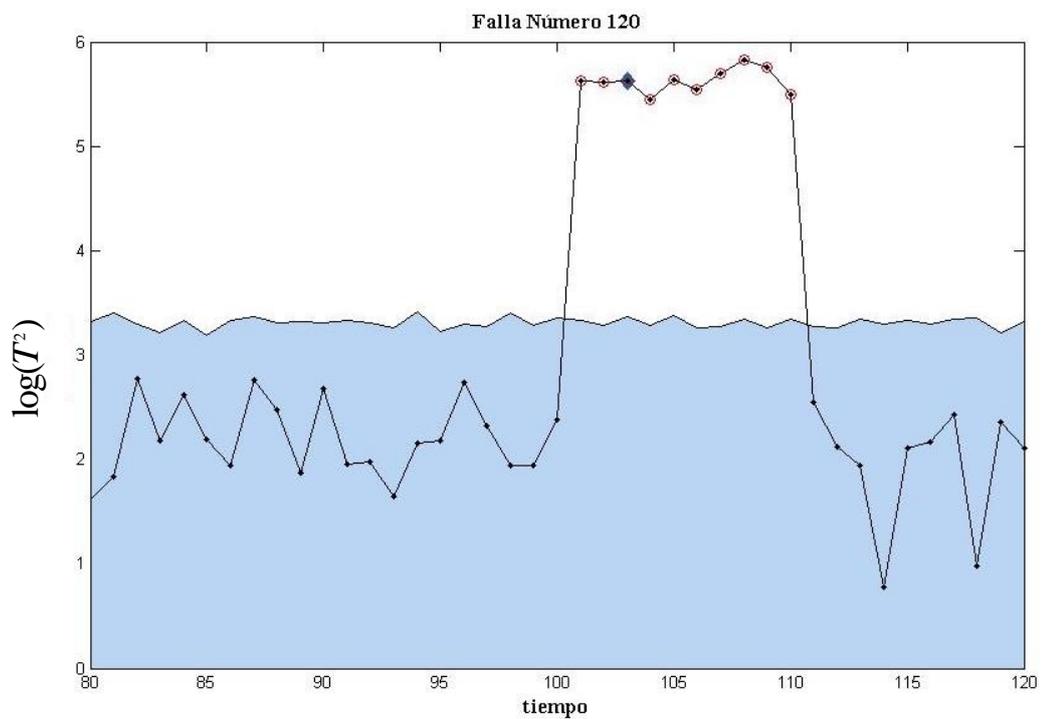


Figura 6.8: Carta de control del T^2 , Falla 120

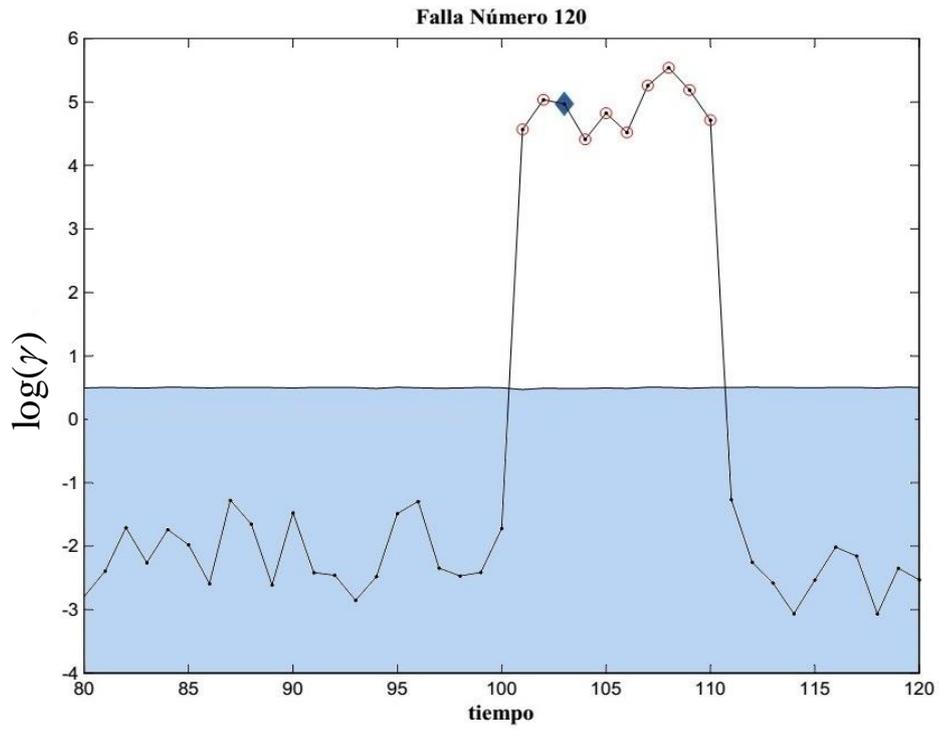


Figura 6.9: Carta de control del γ (KPCA-RBC), Falla 120

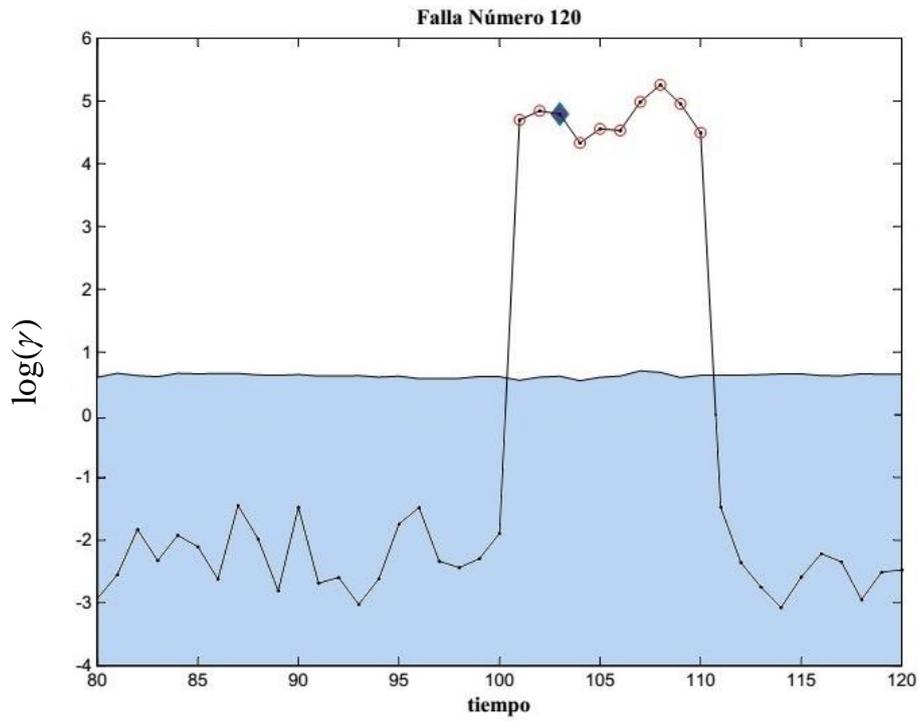


Figura 6.10: Carta de control del γ (KPCA-CN), Falla 120

Un cambio grande en el caudal de aireación afecta principalmente al crecimiento de la biomasa y a la producción de penicilina; llevaría al sistema a saturarse en oxígeno, y en consecuencia a obtener una velocidad máxima de producción de penicilina, ocasionando cambios en las variables monitoreadas, 1, 5, 6, 7 y 8.

Las observaciones 1 y 11 son las que presentan los mayores cambios estandarizados, éstos son 16 y -2.6 respectivamente. Por lo tanto, usando el criterio de identificación empleado en esta tesis, las metodologías de identificación deberían señalar solamente a la variable 1 como sospechosa. Cuando se analizan los porcentajes de cambio de ambas variables con respecto a la trayectoria nominal, se observa que éstos son del 20% (modelado en la falla) y mucho menor al 1%, respectivamente.

A continuación se muestran los resultados de los diferentes métodos de identificación para las distintas estrategias.

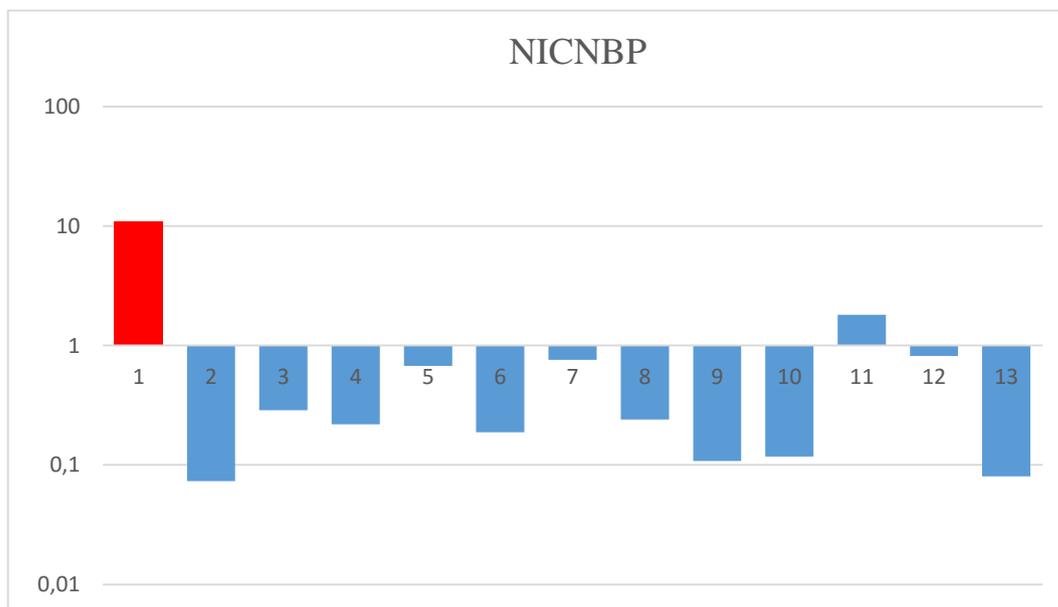


Figura 6.11: Contribuciones de la estrategia NICNBP, Falla 120

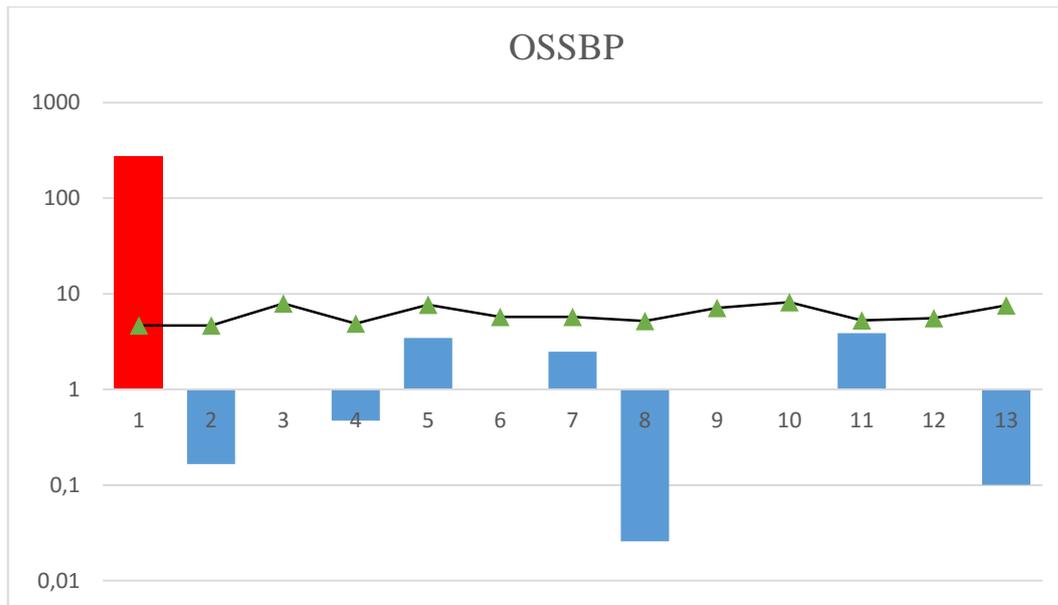


Figura 6.12: Contribuciones de la estrategia OSSBP, Falla 120

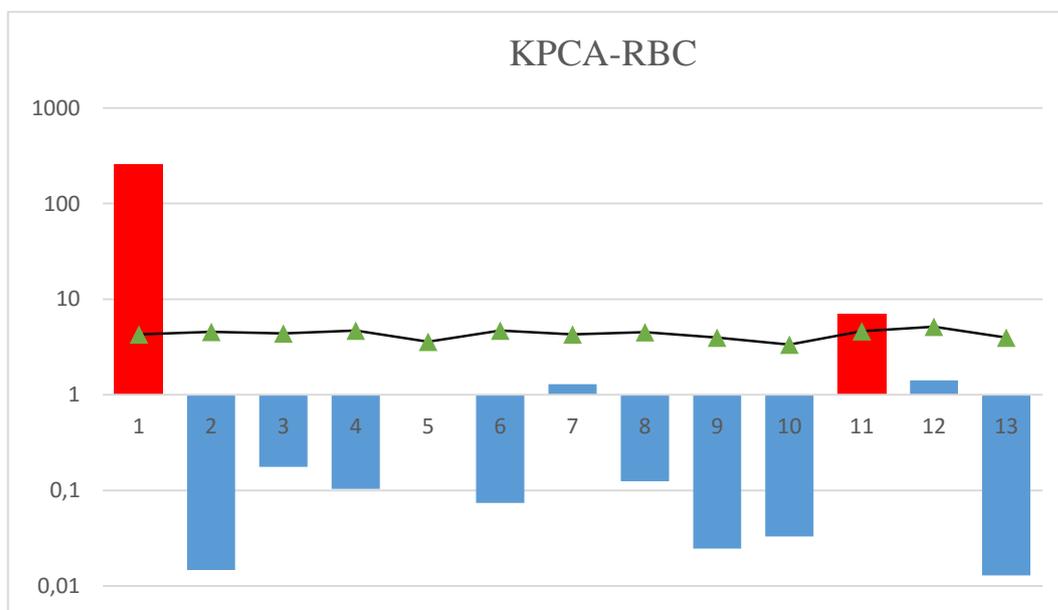


Figura 6.13: Contribuciones de la estrategia KPCA-RBC, Falla 120

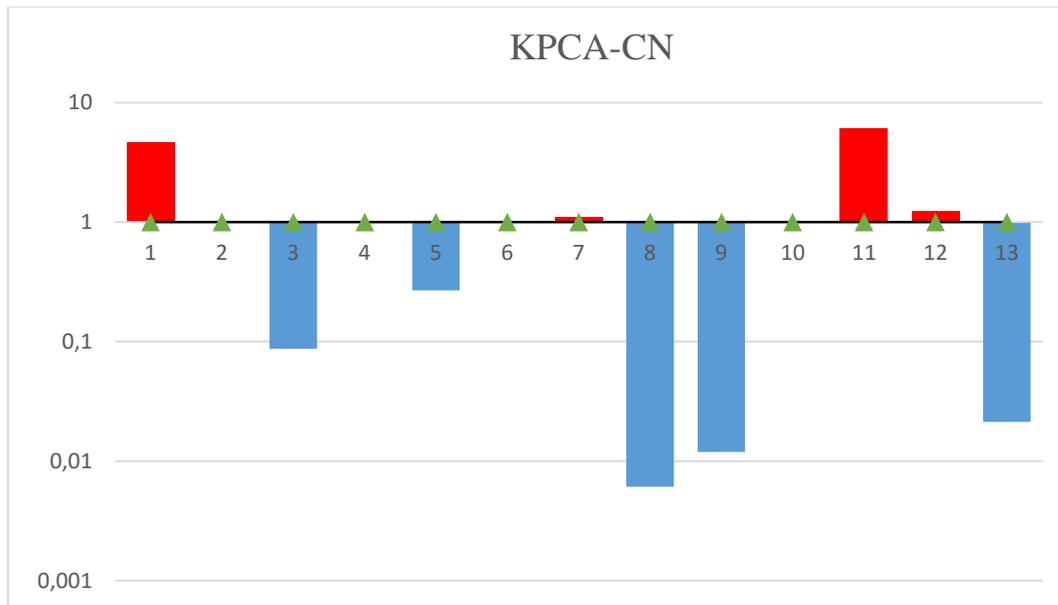


Figura 6.14: Contribuciones de la estrategia KPCA-CN, Falla 120

Se puede observar que las estrategias que realizan la identificación en el espacio de las VOs señalan exclusivamente la variable 1 como sospechosa, es decir su identificación es perfecta, mientras que KPCA-RBC y KPCA-CN reportan los conjuntos {1,11} y {1, 7, 11, 12} de observaciones como sospechosas. Las estrategias que emplean VLs presentan una identificación ambigua, ya que indican la variable sospechosa y además reportan otras.

Por último, se considera la falla 237 perteneciente al tipo R. Esta origina una disminución máxima del 10% en la potencia del agitador (variable 2). El cambio se introduce cuando el proceso se inicia y las tres estrategias lo detectan en k=11 (Etapa I), instante en el que la rampa termina y la variable mantiene el valor alcanzado hasta que termina el proceso. Las cartas de control se muestran a continuación:

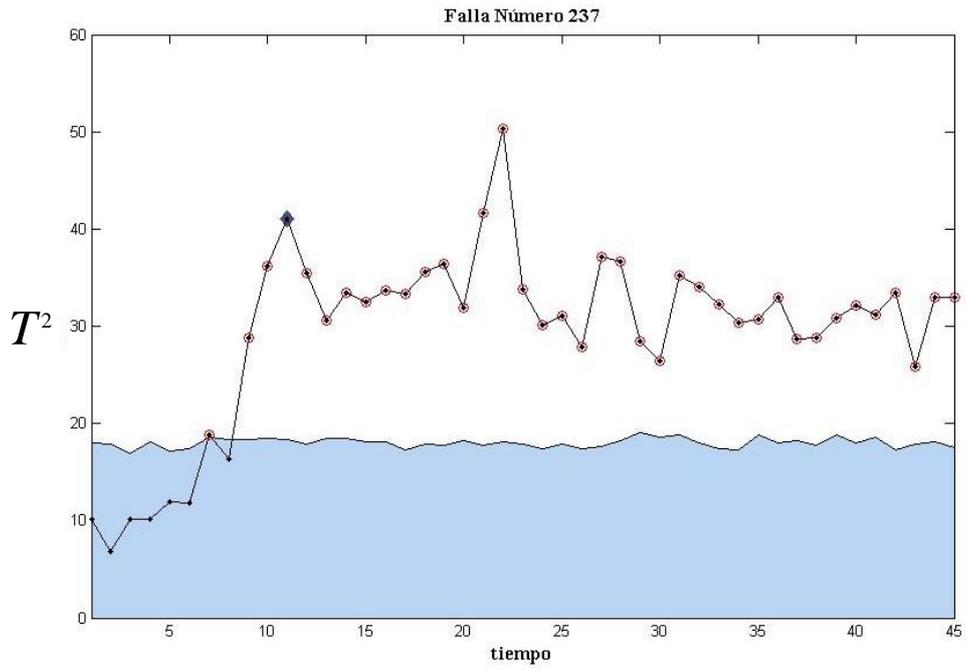


Figura 6.15: Carta de control del T^2 , Falla 237

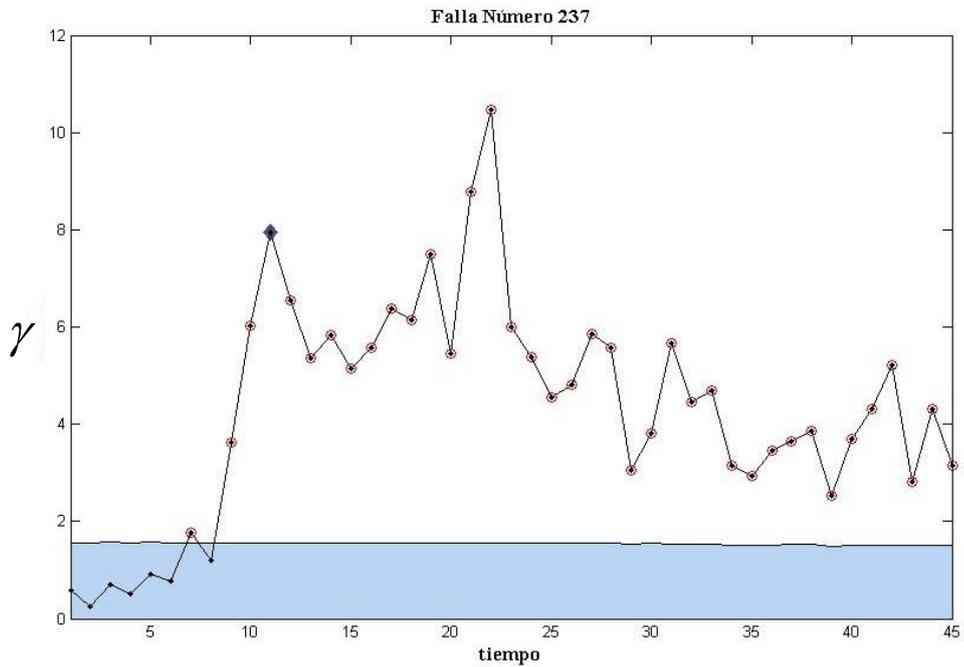


Figura 6.16: Carta de control del estadístico γ (KPCA-RBC), Falla 237

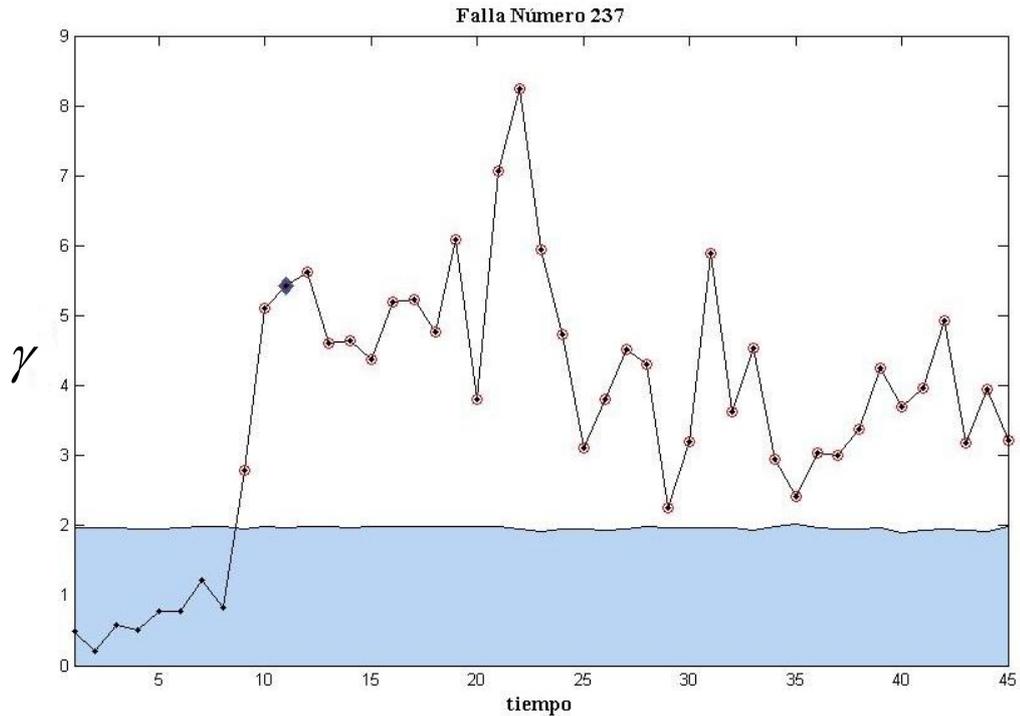


Figura 6.17: Carta de control del γ (KPCA-CN), Falla 237

La disminución de la potencia del agitador origina un sistema no homogéneo de fermentación. Cuando este tipo de fallas son bruscas y permanecen en el tiempo, pueden observarse mediante las variables 2, 4, 5 y 6.

Si se analizan los cambios estandarizados de las variables del proceso en el momento en que se produce la detección, se observa que los mayores valores, -5.2 y 2.18, corresponden a las variables 2 y 10. En consecuencia, la variable 2 se considera sospechosa siguiendo el criterio aplicado en esta tesis. El cálculo del desvío porcentual de las variables con respecto a la trayectoria nominal muestra valores de -10% y menos del 1% para las variables 2 y 10, respectivamente. Los resultados de la identificación de las distintas estrategias analizadas se muestran a continuación:

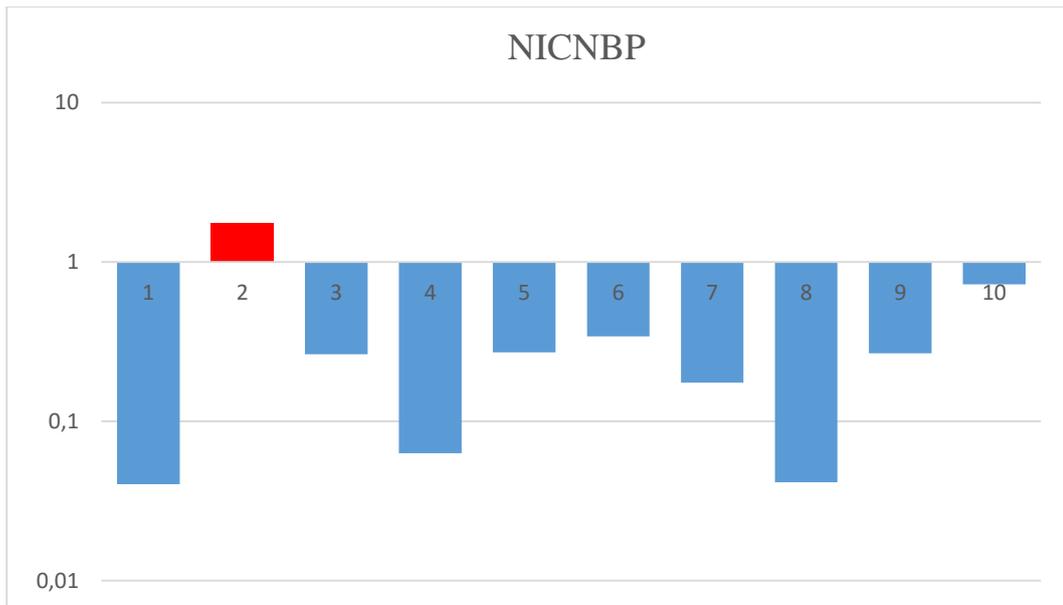


Figura 6.18: Contribuciones de la estrategia NICNBP, Falla 237

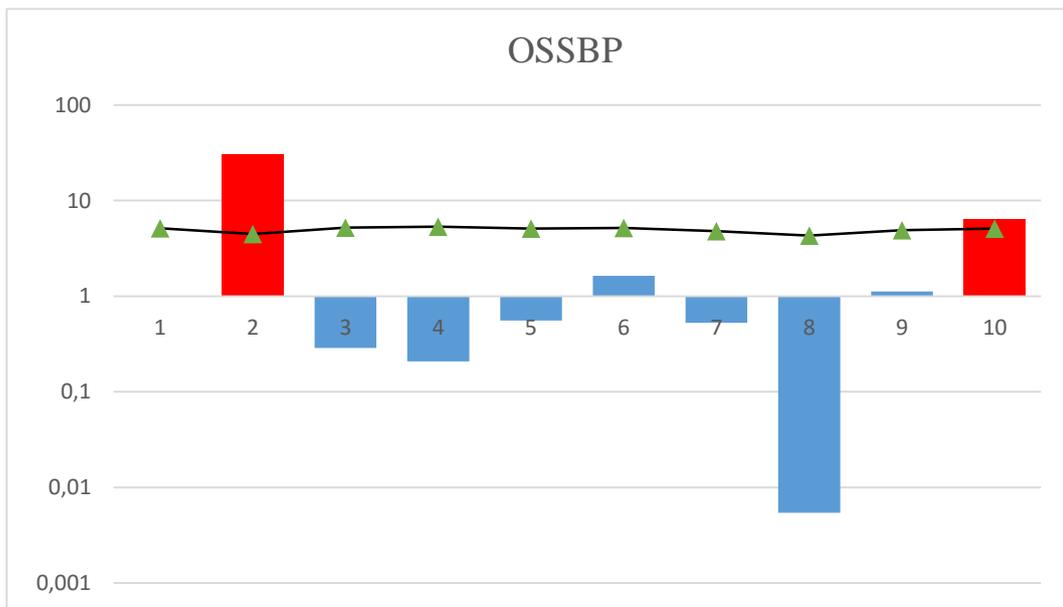


Figura 6.19: Contribuciones de la estrategia NICNBP, Falla 237

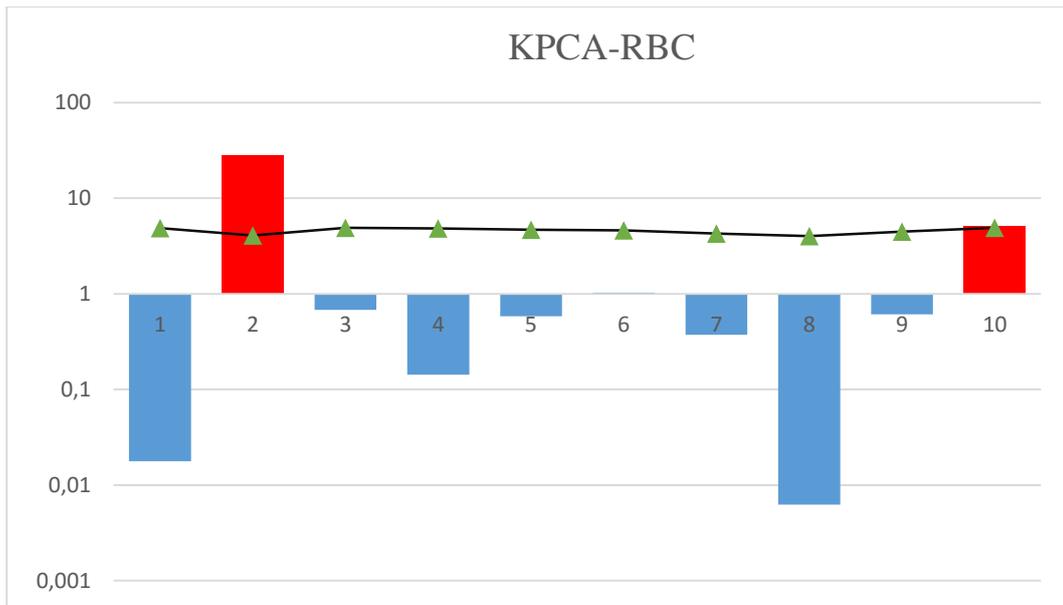


Figura 6.20: Contribuciones de la estrategia KPCA-RBC, Falla 237

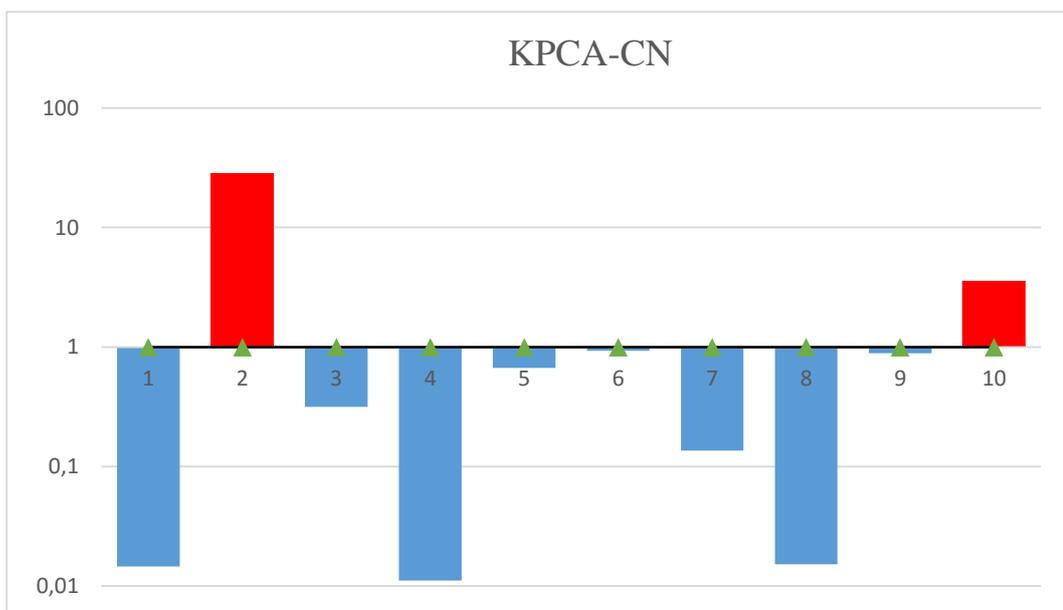


Figura 6.21: Contribuciones de la estrategia KPCA-CN, Falla 237

Las gráficas muestran resultados similares a los obtenidos para la falla en la CIn. La identificación realizada por la estrategia NICNBP señala exclusivamente a la variable 2 como la responsable de la falla, produciendo una identificación perfecta. Las restantes

metodologías indican además a la variable 10 como sospechosa, obteniéndose una identificación ambigua.

A continuación se presentan los resultados obtenidos cuando las diferentes estrategias se ejecutan de manera automática para analizar las 444 fallas del proceso de producción de penicilina. Se utilizan los índices de desempeño previamente definidos.

Para la fase de detección, dichos índices se muestran en la Tabla 6.7. Se observa que las estrategias OSSBP y NICNBP presentan el mismo comportamiento debido a que ambas emplean el T^2 en la fase de detección y estiman su valor crítico con la técnica KDE. Las metodologías que utilizan VLs, si bien aplican el mismo estadístico, calculan su valor crítico de manera diferente.

En la Tabla 6.7 se nota que el T^2 captó mejor las relaciones que poseen las variables del proceso, ya que presenta un menor porcentaje de MA, así como también, los valores más bajos del AST global.

El relación con el índice MA para los distintos tipos de fallas (CIn, E, R), el T^2 presenta los menores valores porcentuales excepto para los cambios en las CIns, cuyo comportamiento es similar al de la metodología KPCA-CN.

En cuanto al AST promedio, el T^2 da buenos resultados para las Rs, pero lo estrategia KPCA-RBC lo supera para las fallas tipo E y CIn.

El comportamiento de las estrategias analizadas para la identificación de variables sospechosas se muestra en la Tabla 6.8. Se observa que el desempeño de la metodología NICNBP es superior a las restantes ya que presenta los mayores valores del PI y los menores para el AI. Por otra parte, el índice II para las técnicas que trabajan con VLs es mejor que para las que utilizan las VOs. Además todos los procedimientos identifican variables como

sospechosas. Las bondades de la metodología NICNBP con respecto a los índices PI y AI también se reflejan para los distintos tipos de fallas.

Tabla 6.7: Índices de detección de las estrategias analizadas

Detección					
	Tipo de Falla	OSSBP	NICNBP	KPCA-RBC	KPCA-CN
MA (%)	Global	16,4	16,4	25,0	27,5
	Escalón	16,2	16,2	24,3	29,0
	Rampa	14,3	14,3	23,8	24,8
	CI	37,5	37,5	41,7	37,5
AST	Global	17,7	17,7	17,9	21,9
	Escalón	5,1	5,1	4,7	5,2
	Rampa	30,6	30,6	32,2	38,6
	CI	9,6	9,6	5,1	11,4

Tabla 6.8: Resultados de identificación de las variables sospechosas

Identificación					
	Tipo de Falla	OSSBP	NICNBP	KPCA-RBC	KPCA-CN
PI(%)	Global	67,4	83,3	76,3	58,4
	Escalón	63,1	82,4	76,1	35,6
	Rampa	72,2	84,4	78,8	82,9
	CI	60,0	80,0	50,0	26,7
AI(%)	Global	28,6	12,7	23,1	40,7
	Escalón	35,8	16,5	23,3	64,4
	Rampa	21,1	8,9	21,3	15,8
	CI	33,3	13,3	42,9	66,7
II(%)	Global	4,0	4,0	0,6	0,9
	Escalón	1,1	1,1	0,6	0,0
	Rampa	6,7	6,7	0,0	1,3
	CI	6,7	6,7	7,1	6,7
VI(%)	Global	0,0	0,0	0,0	0,0
	Escalón	0,0	0,0	0,0	0,0
	Rampa	0,0	0,0	0,0	0,0
	CI	0,0	0,0	0,0	0,0

6.4 Conclusiones

En este capítulo se presentan los resultados de la aplicación de diferentes estrategias de monitoreo a un caso de estudio complejo, el proceso batch-semibatch de producción de penicilina.

Con fines comparativos, se simuló un amplio espectro de fallas del proceso. Estas comprenden 444 condiciones de operación anormales, para diferentes tipos de fallas (E, R, CIn), de diversa magnitud, que ocurren en distintos intervalos de muestreo y presentan diferente duración.

Se fijó el nivel de significado de los test de detección para cada etapa del proceso siguiendo la metodología propuesta por Ramaker y col. (2005) para procesos batch. Esta se basa en comparar estrategias que presenten valores de AVTI similares para las muestras contenidas en la PR. Para la metodología KPCA-RBC el nivel de significado ajustado de la primera fase resultó muy pequeño. Las restantes estrategias no presentan este comportamiento, dado que evitan asumir la pdf del estadístico. Por el contrario, la estiman a partir de los datos de la PR.

Por otra parte, no se habían presentado en la literatura límites de control para las RBC aplicables al método KPCA. Los seleccionados en esta tesis para las CVs de la metodología KPCA-RBC, si bien no tienen rigurosidad estadística, han demostrado un buen desempeño para la identificación de variables sospechosas, de manera tal que pueden ser empleados para automatizar la tarea.

Para este caso de estudio, se observó que el T^2 tiene buena capacidad de detección de eventos anormales, lo que lo convierte en una alternativa válida para el monitoreo de procesos batch empleando modelos locales, cuya matriz de correlación esté bien condicionada.

Finalmente, la técnica de identificación empleada por el método NICNBP mostró muy buen comportamiento para determinar el conjunto de variables que revelan la situación anormal. Se resalta que el procedimiento de identificación estima la CV al valor del estadístico sin asumir que las restantes variables toman valores fijos e iguales a los observados, y que no necesita definir límites de control para las CVs, tarea que hasta el momento siempre se realizó en base a suposiciones. Estas características hacen que el uso del procedimiento de identificación se pueda extender con facilidad a metodologías que trabajan en diversos espacios de VLs. Por otra parte, su simplicidad lo convierte en una herramienta adecuada para su aplicación en el ámbito industrial.

6.5 Referencias

- (1) Alcalá, C.; Qin, S. J. Reconstruction-Based Contribution for Process Monitoring with Kernel Principal Component Analysis. *Am. Control Conf.* **2010**, *49*, 7022-7027.
- (2) Alvarez, C. R.; Brandolin, A.; Sánchez, M. C. Batch Process Monitoring in the Original Measurement's Space. *J. Process Control*, **2010**, *20*, 716-725.
- (3) Chiang, L.; Pell, R.; Seasholtz, M. Exploring Process Data with the Use of Robust Outlier Detection Algorithms. *J. Process Control*, **2003**, *13*, 437-449.
- (4) Godoy, J.; Zumoffen, D.; Vega, J.; Marchetti, J. New Contributions to Non-Linear Process Monitoring through Kernel Partial Least Squares. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2014**, *135*, 76-89.
- (5) Lee, J. M.; Yoo, Ch.; Lee, I. B. Fault detection of batch processes using multiway kernel principal component analysis. *Comput Chem Eng*, **2004**, *28*, 1837-1847.
- (6) Musulin, E.; Bagajewicz, M.; Nogués, J.; Puigjaner, L. Instrumentation Design and Upgrade for PCA Monitoring. *Ind Eng Chem Res.* **2004**, *43*, 2150-2159.
- (7) Ramaker, H. J.; Van Sprang, E. N. M. Statistical Batch Process Monitoring. Ph.D. Thesis, Department of Chemical Engineering, Amsterdam, Universiteit van Amsterdam, 2004.
- (8) Ramaker, H. J.; Van Sprang, E. N. M.; Westerhuis, J. A.; Smilde, A. K. Fault Detection Properties of Global, Local and Time Evolving Models for Batch Process Monitoring. *J Process Control.* **2005**, *15* (7), 799-805.
- (9) Westerhuis, J. A.; Gurden, S. P.; Smilde, A. K. Generalized Contribution Plots in Multivariate Statistical Process Monitoring. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 2000, *51* (1), 95-114.

Capítulo 7

7	<i>Conclusiones y Trabajos Futuros</i>	<i>174</i>
7.1	Conclusiones	174
7.2	Trabajos Futuros	177

Página en Blanco

7 Conclusiones y Trabajos Futuros

7.1 Conclusiones

En este trabajo de tesis se analizaron inicialmente las metodologías de MSPC existentes, tanto aquellas que siguen el comportamiento del proceso en el espacio de las Variables Originales (VOs) como aquellas que las transforman en (VLs). Se excluyó del análisis las estrategias que monitorean de manera explícita las variables de calidad del proceso.

De la revisión concisa y crítica del estado del arte en relación con las fases de detección de eventos anormales e identificación de las mediciones a través de las cuales éstos se revelan, presentada en el Capítulo 1, surgió que los valores críticos de los estadísticos empleados en la etapa de detección se determinan de dos maneras diferentes. Una de ellas asume que la función de densidad de probabilidad (pdf) de las mediciones es normal multivariada, y la pdf del estadístico se determina en concordancia con esta suposición. La otra forma de calcularlo no se sustenta en ningún tipo de suposición, y emplea la técnica Kernel Density Estimation (KDE).

En relación con la fase de identificación, las metodologías existentes estiman la Contribución de una Variable (CV) al valor del estadístico empleando diferentes técnicas. No obstante todos los procedimientos se basan en asumir que los valores de las restantes variables son fijos e iguales a los observados. Otro tema complejo es la asignación de límites de control para las CVs que permitan determinar de manera automática el subconjunto de observaciones mediante las cuales se revela la falla, lo cual es relevante para su diagnóstico. Para tal fin se han fijado límites basados en asumir la pdf de las observaciones o la pdf de las CVs, y otros relacionados con los valores que toman los estadísticos cuando el proceso se encuentra fuera de control. Cabe destacar la falta de estudios de desempeño sistemáticos de las bondades de las metodologías utilizadas en la etapa de identificación, especialmente

cuando se aplican al monitoreo de sistemas no lineales empleando técnicas de descomposición en VLs.

También surge del análisis de la bibliografía que las estrategias publicadas más recientemente presentan mucha complejidad matemática, y no siempre los casos de estudio presentados están relacionados con aplicaciones industriales de interés. También cabe destacar que si bien las metodologías que siguen la operación del proceso en el espacio de las VOs han demostrado ser eficientes cuando la matriz de correlación muestral está bien condicionada, su empleo no se ha extendido.

Teniendo en cuenta el estado del arte en el tema de MSPC, en esta tesis se abordan las actividades de la fase de identificación desde otra perspectiva. Se propone calcular inicialmente las coordenadas del vecino más cercano a la observación que se encuentra en control estadístico, denominado NICN (nearest in control neighbor). En consecuencia, éste se localiza en el exterior de la zona de control estadístico del proceso. Luego se definen las CVs en función de la distancia euclídea entre las coordenadas de la observación y del NICN en cada dirección, dado que todas las variables han sido previamente estandarizadas.

Con el fin de obtener el conjunto de variables sospechosas de manera automática se proponen dos metodologías. Para procesos en estado estacionario es posible determinar los límites de control para las CVs empleando datos simulados de eventos anormales, en base a los cuales se estima la distribución de probabilidad empírica de la CV cuando ésta no revela la falla. Luego se fija el límite de control de la CV mediante la metodología KDE.

En el caso de procesos batch, el procedimiento anterior tiene un alto costo computacional, ya que debe realizarse para cada intervalo de muestreo. Si bien el cálculo de los límites de control para las CVs se realiza fuera de línea, se propone otro enfoque para el aislamiento de variables sospechosas. Este no requiere utilizar límites de control, es decir,

evita todas las suposiciones inherentes a los métodos existentes o la ejecución de numerosas simulaciones. La metodología realiza un agrupamiento jerárquico de las CVs y las divide en dos clusters. Las variables sospechosas están comprendidas dentro del cluster asociado a las CVs cuyos valores son mayores.

El enfoque propuesto para abordar la fase de identificación de variables sospechosas puede ser empleado para estrategias que usan tanto VOs como VLs. En esta tesis se lo aplicó al desarrollo de metodologías de monitoreo que abordan el problema en el espacio de las VOs, por lo tanto las derivaciones se basan en el Estadístico de Hotelling (T^2). Se asume que la matriz de correlación muestral no es singular.

Inicialmente el comportamiento de la metodología propuesta se analizó de manera sistemática empleando casos de estudio simples (reactor tubular continuo, reactor batch con una cinética de primer orden). Se observan algunas diferencias en las capacidades de identificación de las estrategias que abordan la inspección en el espacio de las VOs. Se considera que éstas surgen porque el procedimiento basado en el cálculo del NICN permite movimientos simultáneos de todas las variables al resolver el problema de optimización. En cambio la metodología OSS considera una sola curva paramétrica que define todos los posibles valores del estadístico como una función única de la variable analizada, para valores fijos de las restantes. Esto ocasiona que algunas contribuciones obtenidas usando OSS tomen valores negativos altos.

Por otra parte, el método del NICN trabaja en el espacio de las VOs y por lo tanto emplea solamente el estadístico T^2 . Esto evita la posible pérdida de información originada por la proyección en un espacio de CPs incorrectamente dimensionado, que puede llevar a fallas en la detección (Error Tipo II), y falsas alarmas (Error Tipo I). Por tal motivo, el efecto del

evento anormal puede asignarse a diferentes observaciones haciendo compleja la identificación.

También se comparó el desempeño de la estrategia propuesta con el obtenido empleando metodologías existentes para un caso de estudio complejo. Este corresponde a un fermentador batch para la producción de penicilina, ampliamente utilizado en la literatura para comparar el comportamiento de diferentes estrategias de monitoreo, control y optimización. Se definió un amplio conjunto de fallas y se realizó un estudio sistemático de comparación. Los resultados alcanzados muestran que el nuevo enfoque propuesto para la identificación de las variables que revelan el estado anormal del proceso es una alternativa viable y simple para resolver dicha asignación.

7.2 Trabajos Futuros

A continuación se mencionan los trabajos futuros a realizarse en el área de MSPC.

En esta tesis se propuso un enfoque diferente para estimar las CVs a los estadísticos empleados en la fase de detección, basado en el cálculo de alguna medida de distancia entre la observación y su NICN. También se presentó una metodología para el aislamiento de las variables sospechosas en base al empleo de una técnica de agrupamiento jerárquico. Esta última evita el cálculo de límites de control para las CVs.

En base a dichas contribuciones se planifica modificar la etapa de identificación de la estrategia KPCA. En primera instancia se considera evitar el uso de los límites de control manteniendo la forma de calcular las CVs de las técnicas existentes, y luego realizar la modificación completa de la fase de identificación.

Otro método de monitoreo basado en kernels emplea las Máquinas de Soporte de Vectores (SVM Support Vector Machines), algoritmos de aprendizaje inicialmente desarrollados para clasificar datos en dos clases. La metodología consiste en mapear, de

manera implícita, observaciones obtenidas en condiciones operativas normales al espacio de las características y determinar el hiperplano que maximiza su distancia al origen, asumiendo que éste representa una situación anormal. Durante el monitoreo en línea, se calcula la distancia euclídea de la nueva observación mapeada al margen del hiperplano para analizar la existencia de una falla, y si ésta se detectada se realiza la identificación empleando un método recursivo. Este necesariamente debería ser combinatorio para reducir la incertidumbre, aunque no se propuso realizarlo de esa manera, así como tampoco se presentaron estudios de desempeño de la técnica propuesta. En futuros trabajos se prevé desarrollar una estrategia de identificación basada en el concepto del NICN para la metodología SVM. En base al conocimiento del modelo empírico del proceso obtenido al aplicar la metodología SVM, se propone: encontrar el punto sobre el hiperplano definido en el espacio de las características que se encuentra a la menor distancia de la medición mapeada, calcular las CVs en base a dicho punto y separarlas en dos grupos con el fin de identificar las sospechosas.

Por otra parte, el método de monitoreo Descripción de Datos basada en Vectores de Soporte, SVDD, se diferencia de las SVMs en que determina la posición y radio de la hiperesfera de mínimo volumen que contiene los datos mapeados. Esto reduce la región de los datos normales en el espacio de las características y mejora la sensibilidad, con respecto a las SVMs, para la detección de fallas. Esta tarea se basa en calcular la distancia euclídea al centro de la hiperesfera. El diagnóstico de fallas se realiza calculando índices que reflejan la similitud de la falla con respecto a alguno de los eventos anormales contenidos en una biblioteca de fallas. Solo se han reportado unos pocos ejemplos de aplicación de estas propuestas. Para este tipo de estrategias también se prevé desarrollar una estrategia de identificación de variables basada en el concepto del NICN. Se propone encontrar el punto sobre la hiperesfera que se encuentra a la menor distancia de la medición mapeada en el espacio de las características y proceder como en el caso de la metodología SVM.

Se planifica comparar el comportamiento de las técnicas de MSPC propuestas para el ejemplo de aplicación correspondiente al fermentador de producción de penicilina.

Apéndice 1

A1.1 Test de Hipótesis

El test de hipótesis es una herramienta fundamental de la estadística ya que permite al usuario sacar conclusiones tales como si un individuo puede o no considerarse como parte de una población, o si dos individuos pueden o no considerarse diferentes entre sí.

La hipótesis que se desea testear se denomina hipótesis nula H_0 . El término “nula” indica que ésta es la hipótesis que se mantendrá en el caso de no encontrar evidencia suficiente de que la misma no es cierta. Un punto importante a tener en cuenta es que la hipótesis nula nunca es tomada como cierta, sino que se concluye que existe o no evidencia de que no lo es (para un dado nivel de confianza).

En el enfoque de contraste de hipótesis que se plantea en los tests, se considera la hipótesis alternativa H_1 que puede o no estar enunciada en forma explícita. La hipótesis alternativa no siempre es la negativa de H_0 sino que puede, en algunos casos, definirse en forma más específica.

La estructura básica de un test de hipótesis se muestra en la ecuación (A1.1).

$$\begin{array}{cc}
 \text{(a)} \left\{ \begin{array}{l} H_0: \theta = \theta_0 \\ H_1: \theta \neq \theta_0 \end{array} \right. & \text{(b)} \left\{ \begin{array}{l} H_0: \theta = \theta_0 \\ H_1: \theta = \theta_1 \end{array} \right.
 \end{array} \quad \text{(A1.1)}$$

En el contraste (a), planteado en la ecuación (A1.1), sólo se intenta testear si el valor de θ puede o no considerarse igual a θ_0 . En el (b) se desea determinar si θ es igual a θ_0 o a θ_1 .

Las suposiciones y simplificaciones a los que cada contraste está sujeto dependerán del tipo de comparación planteada y de las características de las poblaciones consideradas. Las decisiones se toman en términos del valor de algún estadístico que permite aceptar o no H_0 para un dado nivel de confianza.

A1.2 Errores Tipo I y Tipo II

Cada vez que se plantea un test de hipótesis se debe estar consciente de que la aceptación o no de H_0 tiene asociada en forma intrínseca una dada probabilidad de cometer un error en dicha decisión.

Cuando se realiza un test de hipótesis existen cuatro situaciones posibles:

- a. H_0 es verdadera y es aceptada.
- b. H_0 es verdadera pero es rechazada.
- c. H_0 es falsa y es rechazada.
- d. H_0 es falsa pero es aceptada.

En los casos a. y c. no se comete error en la aceptación o rechazo de H_0 . Por otra parte, el error cometido en la situación indicada en el punto b. es conocido como Error Tipo I mientras que el descrito en el punto d. se conoce como Error Tipo II.

La probabilidad de cometer un Error Tipo I se identifica con la letra griega α y se conoce como nivel de significación del test, mientras que la probabilidad de incurrir en un Error Tipo II se indica con la letra griega β . La cantidad $(1 - \beta)$ se conoce como potencia del test y es la probabilidad de escoger H_1 cuando ésta es cierta $P(\text{escoger } H_1 | H_1 \text{ es cierta})$.

La probabilidad de Error Tipo I (α), es un parámetro definido por el usuario y toma normalmente valores del 10%, 5%, 2% o 1%. La elección del valor de α está relacionada al riesgo que el analista está dispuesto a correr al rechazar H_0 .

En la Figura A1.1 se observan las funciones de densidad de probabilidad (*pdf*) correspondientes a ambas hipótesis. El valor p_α indica el límite de valores muestrales hasta el cual H_0 será aceptada para un dado nivel de significación α . El área α corresponde a la probabilidad acumulada desde $p_\alpha \rightarrow \infty$. Por el contrario el área β muestra la probabilidad de aceptar H_0 cuando H_1 es verdadera

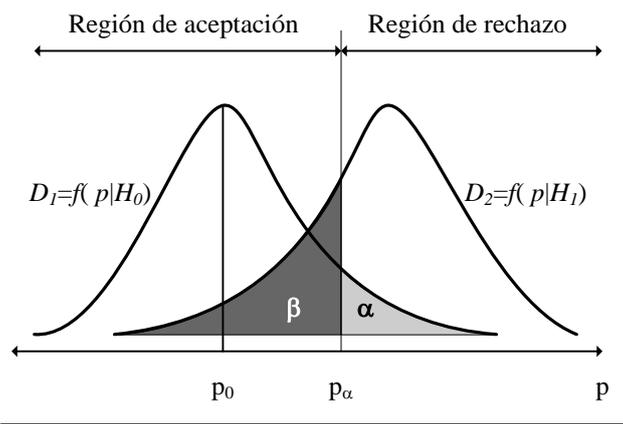


Figura A1.1: Interpretación gráfica de un test de hipótesis

Aunque H_1 estuviese definida en forma explícita y se estuviese evaluando una hipótesis alternativa particular, los valores de α y β no pueden estimarse de manera simultánea. No obstante, puede observarse que mientras menores son los valores de α , mayor serán los de la probabilidad β . Debido a la imposibilidad de conocer simultáneamente α y β , la potencia de los test de hipótesis se estima en la práctica en función de los datos contenidos en las poblaciones utilizadas como referencia, los cuales fueron previamente clasificados.

Apéndice 2

A2.1 Estimación de Funciones de Densidad de Probabilidad. Método del Kernel (KDE)

El método Kernel Density Estimation (KDE) es un procedimiento no paramétrico de estimación de las funciones de densidad de probabilidad. Dado un cierto conjunto de datos (\mathbf{x}), la función de Densidad de Probabilidad $f(x)$ que describe su estructura puede estimarse según:

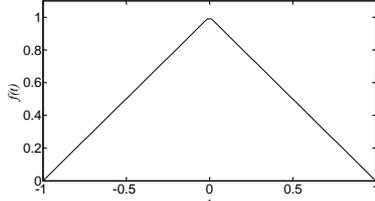
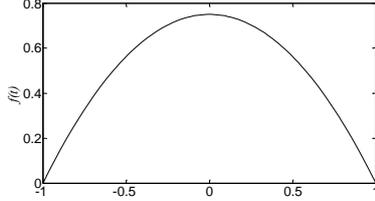
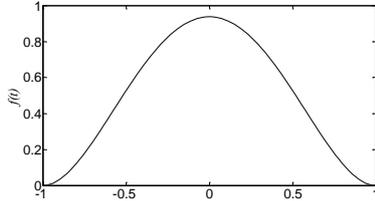
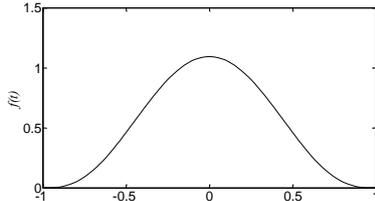
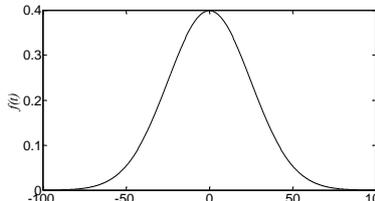
$$\hat{f}(x) = \frac{1}{Ih} \sum_{i=1}^I \mathcal{K} \left\{ \frac{x - x_i}{h} \right\}, \quad (\text{A2.1})$$

donde I es el número de elementos x_i en el conjunto de datos analizado (\mathbf{x}), x es el valor de la variable en el cual quiere estimarse $f(x)$, h es un parámetro llamado ancho de ventana el cual actúa como un factor de peso o suavizado y $\mathcal{K}\{t\}$ es lo que se conoce como kernel, debiendo cumplir con la condición:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{K}\{t\} dt = 1. \quad (\text{A2.2})$$

Frecuentemente la función kernel es una función simétrica, siendo la más utilizada la distribución de probabilidad normal estándar. Sin embargo, resulta válido utilizar otros tipos de funciones, tales como triangulares o Epanechnikov, entre otras (Martinez y Martinez, 2002; Bowman y Azzalini, 1997). En la Tabla A2.1 se resumen las características de algunas funciones generalmente usadas como kernel.

Tabla A2.1: Distribuciones usadas como *kernel* en KDE

Distribución			
Triángular	$\mathcal{K}(t) = (1 - t)$	$-1 \leq t \leq 1$	
Epanechnikov	$\mathcal{K}(t) = \frac{3}{4}(1 - t^2)$	$-1 \leq t \leq 1$	
Biweight	$\mathcal{K}(t) = \frac{15}{16}(1 - t^2)^2$	$-1 \leq t \leq 1$	
Triweight	$\mathcal{K}(t) = \frac{35}{32}(1 - t^2)^3$	$-1 \leq t \leq 1$	
Normal	$\mathcal{K}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{t^2}{2}\right\}$	$-\infty < t < \infty$	

Según la ecuación (A2.1), la estimación de la pdf de \mathbf{x} se obtiene mediante la suma ponderada de las funciones simétricas elegidas como kernel centradas alrededor de cada uno de los I puntos considerados (x_i). Dado que resultan de una combinación lineal de las $\mathcal{K}\{t\}$, los estimadores $\hat{f}(t)$ heredan las propiedades de las mismas en lo que hace a continuidad y derivabilidad.

La Figura A2.1 muestra la estimación de la función $\hat{f}(x)$ para un conjunto de 15 puntos normalmente distribuidos con media nula y desvío estándar unitario usando la distribución normal estándar como kernel.

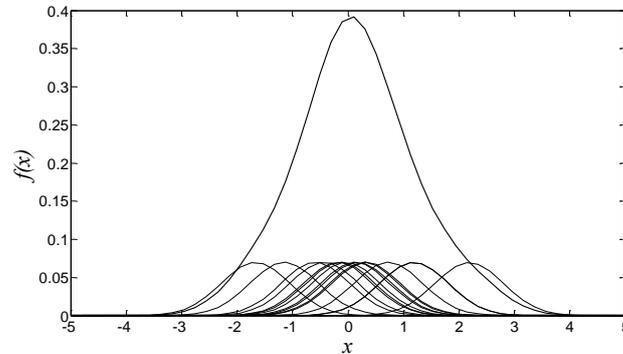


Figura A2.1: Estimación de $f(x)$ basada en un conjunto de datos $\mathbf{x} \approx \mathcal{N}(0;1)$

La selección del valor para el parámetro h es central en esta técnica. La Figura A2.2 muestra las estimaciones de $f(x)$ obtenidas para el mismo conjunto de datos usado en la Figura A3.1 para distintos valores de h . Valores bajos de h darán lugar a estimaciones poco definidas las cuales tendrán una gran cantidad de picos (Figura A2.2 (a)). Por otro lado, valores altos para h llevarán a la obtención de curvas suaves pero que pueden, en algunos casos, disimular la presencia de modos de menor importancia en la distribución.

La determinación de los valores apropiados para h puede hacerse mediante la minimización de la función AMISE (Asymptotic Mean Integrated Square Error), la cual dependerá del tipo de función elegida como kernel (Martinez y Martinez, 2002). Por ejemplo, el valor que minimiza la AMISE, cuando se elige la distribución de probabilidad normal estándar como kernel, es:

$$h = \left(\frac{4}{3}\right)^{1/5} \sigma I^{-1/5} \approx 1,06 \sigma I^{-1/5}, \quad (\text{A2.3})$$

siendo σ el desvío estándar del vector \mathbf{x} .

Los pasos requeridos para la implementación de KDE se muestran en la Tabla A2.2 (Martinez y Martinez, 2002). Para distribuciones que sólo tienen valores positivos, como las χ^2 ó \mathcal{F} por ejemplo, los valores de \mathbf{x} se transforman usando logaritmos.

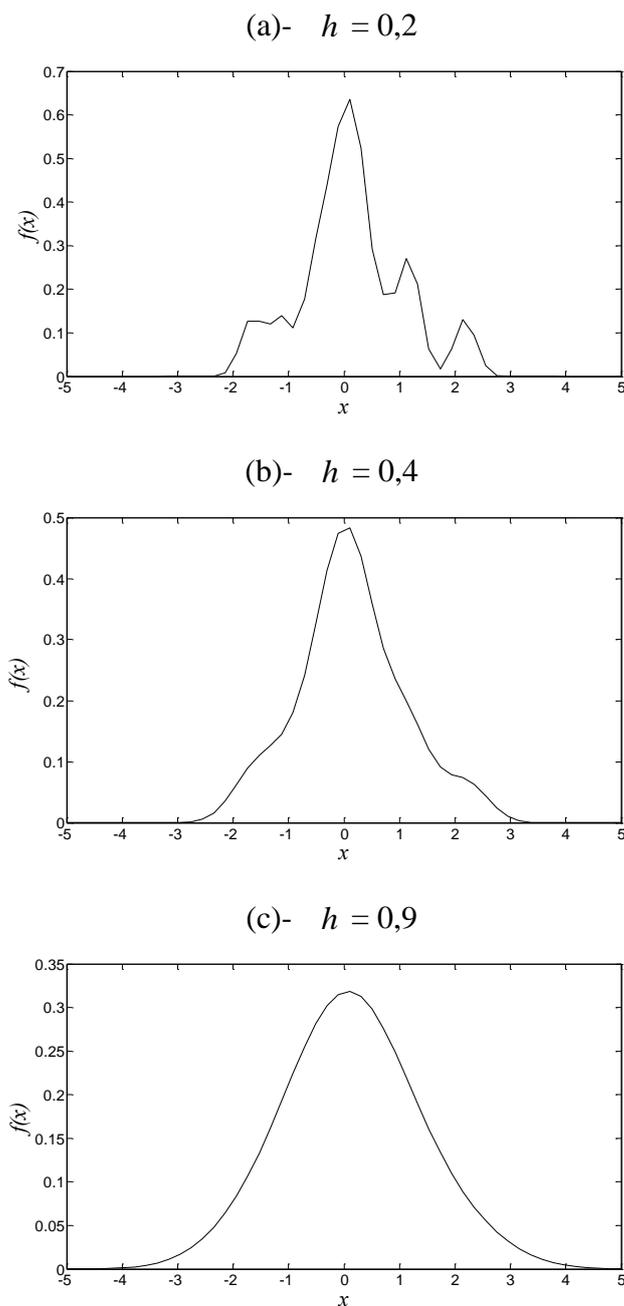


Figura A2.2: Estimaciones de $f(x)$ usando distintos valores de h

Tabla A2.2: Algoritmo de cálculo de $\hat{f}(x)$ usando KDE

1. Seleccionar la función que se utilizará como kernel y un valor apropiado para el ancho de ventana h . Definir el dominio sobre el cual se realizará la estimación de $f(x)$ y establecer un conjunto de puntos de estimación de dicho dominio (\mathbf{y}).
2. Para cada uno de los puntos x_i en \mathbf{x} evaluar el valor de la función $\mathcal{K}_i(y)$ en todos los puntos y_i de \mathbf{y} .

$$\mathcal{K}_i(y) = \mathcal{K} \left\{ \frac{y - x_i}{h} \right\}; \quad i = 1, 2, \dots, I.$$

Como resultado de ésto se obtendrá un conjunto de I curvas centradas en cada uno de los puntos muestrales x_i .

3. Ponderar cada una de estas curvas por el factor $1/h$.
 4. Calcular el valor de $\hat{f}(y)$ para cada y_i como el promedio de las I curvas obtenidas en el paso 3.
-

A2.2 Referencias

- 1) Bowman, A. W. y A. Azzalini (1997). Applied Smoothing Techniques for Data Analysis, Oxford, Oxford University Press.
- 2) Martinez, W. L. y A. R. Martinez (2002). Computational Statistics Handbook with Matlab, London, Chapman & Hall/CRC

Apéndice 3

A3.1 Límite de control para estadísticos de forma cuadrática

Box (1954) demostró que si \mathbf{x} es un vector compuesto por J variables aleatorias, tal que $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{V})$ y, si

$$Q = \mathbf{xMx}^T \quad (\text{A3.1})$$

es cualquier forma cuadrática real, de rango $r \leq J$, entonces la distribución de probabilidad de Q puede aproximarse como sigue:

$$Q \sim g \chi^2(h). \quad (\text{A3.2})$$

Los valores g y h se determinan en función de los autovalores de la matriz \mathbf{U} :

$$\mathbf{U} = \mathbf{VM} \quad (\text{A3.3})$$

de manera tal que:

$$g = \frac{K_2}{K_1} \quad (\text{A3.4})$$

$$h = \frac{[K_1]^2}{K_2} \quad (\text{A3.5})$$

siendo:

$$K_1 = \text{tr}\{\mathbf{U}\} \quad (\text{A3.6})$$

$$K_2 = \text{tr}\{\mathbf{U}\}^2 \quad (\text{A3.7})$$

Los estadísticos D^2 , SPE y γ se formulan, de manera general, mediante la siguiente forma cuadrática:

$$\text{Estadístico} = \mathbf{x}\mathbf{M}\mathbf{x}^T \quad (\text{A3.8})$$

Yue y Qin (2001) se basaron en el trabajo de Box (1954) para calcular los valores críticos de dichos estadísticos. Asumieron que \mathbf{x} sigue una distribución normal multivariada y \mathbf{V} puede considerarse igual a la matriz de correlación muestral de \mathbf{x} , por lo tanto, $\text{Estadístico} \sim g \chi^2(h)$.

Recordando que la traza de una matriz es la sumatoria de los elementos de la diagonal o la sumatoria de sus autovalores asociados, se pueden obtener los parámetros g y h para todo estadístico definido en forma cuadrática, cuando las mediciones siguen una distribución multinormal, tal como se explica a continuación.

A3.1.1 Estadísticos en el espacio de las variables latentes

Se asume que la distribución del vector de mediciones estandarizado \mathbf{x} es multinormal, $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{\Omega})$, y la matriz de correlación muestral \mathbf{R} es una buena aproximación de la matriz de varianza-covarianza poblacional $\mathbf{\Omega}$. Tal como se explicó en el Capítulo 2, de la descomposición en autovalores y autovectores de \mathbf{R} resulta que:

$$\mathbf{R} = [\mathbf{P} \tilde{\mathbf{P}}] \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{\Lambda}} \end{bmatrix} [\mathbf{P} \tilde{\mathbf{P}}]^T = \bar{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{\Lambda}} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}^T \quad (\text{A3.9})$$

A3.1.1.1 Estadístico D^2

La matriz \mathbf{M} de pesos correspondiente al D^2 es:

$$\mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{P}^T \quad (\text{A3.10})$$

Por lo tanto \mathbf{U} se calcula empleando las ecuaciones (A3.9) y (A3.10) como sigue:

$$\mathbf{U} = \mathbf{RM} = \bar{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \Lambda & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\Lambda} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}^T \bar{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \Lambda^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}^T = \mathbf{PIP}^T \quad (\text{A3.11})$$

Recordando las ecuaciones (A3.6) y (A3.7) y el concepto de traza de una matriz, las ecuaciones (A3.4) y (A3.5) se reescriben de la siguiente manera para el D^2 :

$$g^{D^2} = 1 \quad (\text{A3.12})$$

$$h^{D^2} = Rt \quad (\text{A3.13})$$

A3.1.1.2 Estadístico SPE

Cuando se considera la porción residual del modelo PCA, la matriz \mathbf{M} de pesos se define como:

$$\mathbf{M} = \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\mathbf{P}}^T \quad (\text{A3.14})$$

En tal caso la ecuación \mathbf{U} se evalúa usando las ecuaciones (A3.9) y (A3.14) como se muestra a continuación:

$$\mathbf{U} = \mathbf{RM} = \bar{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \Lambda & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\Lambda} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}^T \bar{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}^T = \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{P}}^T \quad (\text{A3.15})$$

Recordando las ecuaciones (A3.6) y (A3.7) y el concepto de traza de una matriz, las ecuaciones (A3.4) y (A3.5) se reescriben de la siguiente manera para el SPE:

$$g^{SPE} = \frac{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j} \quad (\text{A3.16})$$

$$h^{SPE} = \frac{\left[\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j \right]^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2} \quad (\text{A3.17})$$

A3.1.1.3 Estadístico γ

La matriz \mathbf{M} de pesos correspondiente al γ es:

$$\mathbf{M} = \bar{\mathbf{P}}\mathbf{\Lambda}_\gamma\bar{\mathbf{P}}^T = \bar{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda}^{-1}/D_C^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{J-Rt}/SPE_C \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}^T \quad (\text{A3.18})$$

La matriz \mathbf{U} se puede estimar reemplazando las ecuaciones (A3.9) y (A3.18) en la ecuación (A3.3):

$$\mathbf{U} = \mathbf{R}\mathbf{M} = \bar{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{\Lambda}} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}^T \bar{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda}^{-1}/D_C^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{J-Rt}/SPE_C \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}^T \quad (\text{A3.19})$$

Reordenando y realizando las operaciones pertinentes se obtiene:

$$\mathbf{U} = \bar{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \mathbf{I}/D_C^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{\Lambda}}/SPE_C \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}^T \quad (\text{A3.20})$$

Por lo tanto

$$\mathbf{U}^2 = \bar{\mathbf{P}} \begin{bmatrix} \mathbf{I}/(D_C^2)^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{\Lambda}}^2/(SPE_C)^2 \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}^T \quad (\text{A3.21})$$

Recordando las ecuaciones (A3.6) y (A3.7) y el concepto de traza de una matriz, las ecuaciones (A3.4) y (A3.5) se reescriben como se indica a continuación:

$$g^\gamma = \frac{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{SPE_C^2}}{\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{SPE_C}} \quad (\text{A3.22})$$

$$h^\gamma = \frac{\left[\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{SPE_C} \right]^2}{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{SPE_C^2}} \quad (\text{A3.23})$$

donde λ_j representa el j -ésimo autovalor asociado a la matriz de correlación muestral y Rt es el número de componentes retenidos del modelo PCA.

La formulación de los tres estadísticos críticos se resume en la Tabla A3.1.

Tabla A3.1: Parámetros de la distribución de probabilidad de D^2 , SPE y γ

<i>Estadístico</i> $\sim g^{\text{Estadístico}} \chi(h^{\text{Estadístico}})$			
	D^2	SPE	γ
$g^{\text{Estadístico}}$	1	$\frac{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j}$	$\frac{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{SPE_C^2}}{\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{SPE_C}}$
$h^{\text{Estadístico}}$	Rt	$\frac{\left[\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j \right]^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2}$	$\frac{\left[\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{SPE_C} \right]^2}{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{SPE_C^2}}$

A3.1.2 Estadísticos en el espacio latente de las características

Cuando se utilizan estrategias de monitoreo basadas en métodos kernel, los vectores observación estandarizados \mathbf{x} se proyectan en un espacio de variables latentes, denominado espacio de las características. Los vectores mapeados en dicho espacio se identifican como $\boldsymbol{\varphi} = \Phi(\mathbf{x})$. Se estima que $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{S}^\varphi)$ siendo \mathbf{S}^φ la matriz de covarianza muestral de los vectores $\boldsymbol{\varphi}$ centrados. De la descomposición en autovalores y autovectores de \mathbf{S}^φ resulta:

$$\mathbf{S}^\varphi = (I-1)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{P}_f & \tilde{\mathbf{P}}_f \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\boldsymbol{\Lambda}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{P}_f & \tilde{\mathbf{P}}_f \end{bmatrix}^T = (I-1)^{-1} \bar{\mathbf{P}}_f \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\boldsymbol{\Lambda}} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}_f^T \quad (\text{A3.24})$$

A3.1.2.1 Estadístico D^2

Tal como se indicó en el Capítulo 2, la matriz \mathbf{M} de pesos para D^2 es:

$$\mathbf{M} = (\mathbf{I} - \mathbf{1}) \mathbf{P}_f \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{P}_f^T \quad (\text{A3.25})$$

y la matriz \mathbf{U} se calcula empleando las ecuaciones (A3.24) y (A3.25) de la siguiente manera:

$$\mathbf{U} = \mathbf{S}^\phi \mathbf{M} = (\mathbf{I} - \mathbf{1})^{-1} \bar{\mathbf{P}}_f \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{\Lambda}} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}_f^T \bar{\mathbf{P}}_f \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}_f^T (\mathbf{I} - \mathbf{1}) = \mathbf{P}_f \mathbf{I} \mathbf{P}_f^T \quad (\text{A3.26})$$

Recordando las ecuaciones (A3.6) y (A3.7) y el concepto de traza de una matriz, las ecuaciones (A3.4) y (A3.5) se reescriben a continuación para el D^2 :

$$g^{D^2} = 1 \quad (\text{A3.27})$$

$$h^{D^2} = R^2 \quad (\text{A3.28})$$

A3.1.2.2 Estadístico SPE

Cuando se considera la porción residual del modelo PCA, la matriz \mathbf{M} de pesos se define como:

$$\mathbf{M} = \tilde{\mathbf{P}}_f \tilde{\mathbf{I}} \tilde{\mathbf{P}}_f^T \quad (\text{A3.29})$$

En tal caso \mathbf{U} se calcula utilizando las ecuaciones (A3.24) y (A3.29):

$$\mathbf{U} = \mathbf{S}^\phi \mathbf{M} = (\mathbf{I} - \mathbf{1})^{-1} \bar{\mathbf{P}}_f \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{\Lambda}} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}_f^T \bar{\mathbf{P}}_f \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}_f^T = (\mathbf{I} - \mathbf{1})^{-1} \tilde{\mathbf{P}}_f \tilde{\mathbf{\Lambda}} \tilde{\mathbf{P}}_f^T \quad (\text{A3.30})$$

Recordando las ecuaciones (A3.6) y (A3.7) y el concepto de traza de una matriz, las ecuaciones (A3.4) y (A3.5) se reescriben para el estadístico SPE como se muestra a continuación:

$$g^{SPE} = (I-1)^{-1} \frac{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j} \quad (A3.31)$$

$$h^{SPE} = \frac{\left[\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j \right]^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2} \quad (A3.32)$$

A3.1.2.3 Estadístico γ

Considerando la formulación del γ en el espacio de las características, la matriz \mathbf{M} es:

$$\mathbf{M} = \bar{\mathbf{P}}_f \Lambda_\gamma \bar{\mathbf{P}}_f^T = \bar{\mathbf{P}}_f \begin{bmatrix} (I-1)\Lambda^{-1}/D_C^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{J-Rt}/SPE_C \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}_f^T \quad (A3.33)$$

En consecuencia, la matriz \mathbf{U} se calcula mediante la ecuación (A3.3) empleando las ecuaciones (A3.24) y (A3.33):

$$\mathbf{U} = \mathbf{S}^q \mathbf{M} = \bar{\mathbf{P}}_f \begin{bmatrix} \Lambda/(I-1) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\Lambda}/(I-1) \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}_f^T \bar{\mathbf{P}}_f \begin{bmatrix} (I-1)\Lambda^{-1}/D_C^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{J-Rt}/SPE_C \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}_f^T \quad (A3.34)$$

Reordenando y realizando las operaciones pertinentes resulta que:

$$\mathbf{U} = \bar{\mathbf{P}}_f \begin{bmatrix} \mathbf{I}/D_C^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\Lambda}/[(I-1)SPE_C] \end{bmatrix} \bar{\mathbf{P}}_f^T \quad (A3.35)$$

Recordando las ecuaciones (A3.6) y (A3.7) y el concepto de traza de una matriz, las ecuaciones (A3.4) y (A3.5) se reescriben para el γ de la siguiente manera:

$$g^\gamma = \frac{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{(I-1)^2 SPE_C^2}}{\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{(I-1)SPE_C}} \quad (A3.36)$$

$$h^\gamma = \frac{\left[\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{(I-1)SPE_C} \right]^2}{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{(I-1)^2 SPE_C^2}} \quad (A3.37)$$

donde λ_j representa el j -ésimo autovalor asociado a la matriz \mathbf{S}° y Rt indica el número de componentes retenidos del modelo PCA.

La formulación de los tres estadísticos críticos se resume en la Tabla A3.1

Tabla A3.2: Parámetros de la distribución de probabilidad del D^2 , SPE y γ (KPCA)

$Estadístico = g^{Estadístico} \chi(h^{Estadístico})$			
	D^2	SPE	γ
$g^{Estadístico}$	1	$\frac{1}{(I-1)} \frac{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j}$	$\frac{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{(I-1)^2 SPE_C^2}}{\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{(I-1)SPE_C}}$
$h^{Estadístico}$	Rt	$\frac{\left[\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j \right]^2}{\sum_{j=Rt+1}^J \lambda_j^2}$	$\frac{\left[\frac{Rt}{D_C^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j}{(I-1)SPE_C} \right]^2}{\frac{Rt}{(D_C^2)^2} + \sum_{j=Rt+1}^J \frac{\lambda_j^2}{(I-1)^2 SPE_C^2}}$

A3.2 Límite de control para las RBC

Alcala y Qin (2009) propusieron una forma cuadrática para calcular las RBCs, y calcularon sus límites de control siguiendo el trabajo de Box (1954).

Dichos autores formularon la RBC de la j -ésima variable de la siguiente forma:

$$RBC_j = \mathbf{xM}\xi_j \left(\xi_j^T \mathbf{M} \xi_j \right)^{-1} \xi_j^T \mathbf{M} \mathbf{x}^T \quad (\text{A3.38})$$

donde \mathbf{M} puede tomar la forma asociada a cada uno de los estadísticos definidos en el espacio de las variables latentes.

Recordando la ecuación (A3.3), \mathbf{U} se define nuevamente como sigue:

$$\mathbf{U} = \mathbf{RM}^{\text{RBC}} = \mathbf{RM}\xi_j \left(\xi_j^T \mathbf{M} \xi_j \right)^{-1} \xi_j^T \mathbf{M} \quad (\text{A3.39})$$

y empleando el procedimiento descrito previamente, se obtienen los siguientes valores para g y h para la j -ésima variable:

$$g_j^{\text{Estadístico}} = \frac{\xi_j^T \mathbf{M} \mathbf{S} \mathbf{M} \xi_j}{\xi_j^T \mathbf{M} \xi_j} \quad (\text{A3.40})$$

$$h_j^{\text{Estadístico}} = 1 \quad (\text{A3.41})$$

Entonces, las RBCs del γ siguen la distribución:

$$RBC_j \sim g_j^\gamma \chi(h_j^\gamma) = g_j^\gamma \chi(1) \quad (\text{A3.42})$$

Reemplazando la definición de \mathbf{M} en la ecuación (A3.40) se obtiene:

$$g_j^\gamma = \frac{\xi_j^T \begin{bmatrix} \mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T/D_c^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\mathbf{P}}^T/SPE_c \end{bmatrix} \mathbf{R} \begin{bmatrix} \mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T/D_c^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\mathbf{P}}^T/SPE_c \end{bmatrix} \xi_j}{\xi_j^T \begin{bmatrix} \mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T/D_c^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\mathbf{P}}^T/SPE_c \end{bmatrix} \xi_j} \quad (\text{A3.43})$$

Es posible reformular este parámetro como se explica a continuación.

Si se multiplica la definición de \mathbf{R} , presentada en la ecuación (A3.9), por la matriz \mathbf{M} que define el γ surge que:

$$\mathbf{MR} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T\mathbf{P}\Lambda\mathbf{P}^T/D_C^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{P}}^T/SPE_C \end{bmatrix} \quad (\text{A3.44})$$

y como $\mathbf{P}^T\mathbf{P} = \mathbf{I}$, la ecuación (A3.44) se reformula como:

$$\mathbf{MR} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}/D_C^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{P}}^T/SPE_C \end{bmatrix} \quad (\text{A3.45})$$

Luego se pos multiplica la ecuación (A3.45) por \mathbf{M} :

$$\begin{aligned} \mathbf{MRM} &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}\mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T/(D_C^2)^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{P}}^T\tilde{\mathbf{P}}^T/(SPE_C)^2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T/(D_C^2)^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{P}}^T/(SPE_C)^2 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A3.46})$$

y se reemplaza la ecuación (A3.46) y (A3.18) en (A3.40), y se obtiene que:

$$g_j^\gamma = \frac{\xi_j \begin{bmatrix} \mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T/(D_C^2)^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{P}}^T/(SPE_C)^2 \end{bmatrix} \xi_j^T}{\xi_j \begin{bmatrix} \mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T/D_C^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{P}}\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{P}}^T/SPE_C \end{bmatrix} \xi_j^T} \quad (\text{A3.47})$$

Si se considera exclusivamente el j -ésimo elemento de las matrices contenidas en la ecuación (A3.47), resulta:

$$g_j^\gamma = \frac{\frac{(\mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T)_{j,j}}{(D_C^2)^2} + \frac{(\tilde{\mathbf{P}}\tilde{\Lambda}\tilde{\mathbf{P}}^T)_{j,j}}{SPE_C^2}}{\frac{(\mathbf{P}\Lambda^{-1}\mathbf{P}^T)_{j,j}}{D_C^2} + \frac{(\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{P}^T)_{j,j}}{SPE_C}} \quad (\text{A3.48})$$

donde el subíndice j,j representa la posición de la fila j y columna j de la matriz correspondiente.

A3.3 Referencias

- (1) Alcalá, C.; Qin, S. J. Reconstruction-Based Contribution for Process Monitoring. *Automatica*, **2009**, *45*, 1593-1600.
- (2) Box, G. E. P. Some Theorems on Quadratic Forms Applied in the Study of Analysis of Variance Problems, I. Effect of Inequality of Variance in the One-Way Classification". *Ann. Math. Stat.* **1954**, *25* (2), 290-302.
- (3) Yue, H. H.; Qin, J. S. Reconstruction Based Fault Identification Using a Combined Index. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2001**, *40* (20), 4403–4414.

Nomenclatura General

Variables	Descripción
$\mathbf{1}_I$	Vector I -dimensional con elementos iguales a $1/I$
a	Elemento de la inversa de la matriz de correlación muestral
$c_j^{T^2}$	Contribución al Estadístico de Hotelling de la variable j
$c_j^{D^2}$	Contribución al Estadístico de Hotelling en el espacio de los CPs retenidos de la variable j
c_j^{SPE}	Contribución al Error Cuadrático de Predicción de la variable j
c_j^{NICN}	Contribución al T^2 según el método basado en el NICN de la variable j
\mathbf{c}^{NICN}	Vector de contribuciones al T^2 empleando el método basado en el NICN
$\overline{c_j^{T^2}}$	Media de las contribuciones al T^2 en la PR para la variable j
$\overline{c_j^{D^2}}$	Media de las contribuciones al D^2 en la PR para la variable j
$\overline{c_j^{SPE}}$	Media de las contribuciones al SPE en la PR para la variable j
$\overline{c_j^{RBC^k}}$	Media de las RBCs en la PR para la variable j

D^2	Estadístico de Hotelling en el espacio de los CPs retenidos
D_C^2	Valor crítico del estadístico Hotelling en el espacio de los CPs retenidos
\mathbf{e}	Vector de errores de representación del modelo que retiene Rt CPs
\mathbf{E}_r	Matriz de errores de representación del modelo que retiene Rt CPs
\mathbf{E}	Matriz cuyos elementos son iguales a $1/I$
f	Magnitud de la reconstrucción de una medición
$\mathcal{F}_{J, I-J}$	Distribución \mathcal{F} con grados de libertad J e $(I-J)$
\mathbf{F}	Matriz definida para centrar \mathbf{K}
g	Parámetro de la distribución de probabilidad de un estadístico en forma cuadrática
g_{cv}	Parámetro de la distribución de probabilidad de la CV expresada en forma cuadrática
h	Parámetro de la distribución de probabilidad de un estadístico en forma cuadrática
I	Número de observaciones contenidas en PR
\mathbf{I}	Matriz identidad
J	Número de variables de proceso
K	Número total de intervalos de muestreo de un proceso batch
$k(\cdot)$	Función kernel

\mathbf{k}	Vector kernel
$\bar{\mathbf{k}}$	Vector kernel centrado
\mathbf{K}	Matriz Gran Kernel
$\bar{\mathbf{K}}$	Matriz Gran Kernel centrada
L	Función de Lagrange
m	Media del SPE en la PR
\mathbf{M}	Matriz asociada a una forma cuadrática
mag	Magnitud de la desviación simulada
nc	Número de clusters
$\bar{\mathbf{p}}$	Vector columna de la matriz de proyección $\bar{\mathbf{P}}$
$\bar{\mathbf{P}}$	Matriz de autovectores de \mathbf{R}
\mathbf{P}	Matriz de proyección de \mathbf{x} en el espacio de los CPs retenidos
$\tilde{\mathbf{P}}$	Matriz de proyección de \mathbf{x} en el espacio de los CPs excluidos
$\bar{\mathbf{P}}^\varphi$	Matriz de autovectores de \mathbf{S}^φ
\mathbf{P}^φ	Matriz de proyección de φ en el espacio de los CPs retenidos
$\tilde{\mathbf{P}}^\varphi$	Matriz de proyección de φ en el espacio de los CPs excluidos
$\mathbf{P}^{\mathbf{K}}$	Matriz de autovectores retenidos de \mathbf{K}
Rt	Número de CPs retenidos
RBC	Contribución de la Variable basada en la Reconstrucción

R	Matriz de correlación muestral de las observaciones contenidas en la
PR	
SPE	Error cuadrático de representación
SPE_C	Error cuadrático de representación crítico
S	Matriz de covarianza muestral de las observaciones contenidas en la
PR	
S^φ	Matriz de covarianza muestral de los vectores φ asociados a la PR
T²	Estadístico de Hotelling
T_C²	Estadístico de Hotelling crítico
T_k^{2MIN}	Estadístico de Hotelling mínimo para la variable <i>k</i> dados los valores de
las	
	(<i>J</i> -1) variables restantes
T_{j+1,1,...,j}²	Contribución de la (<i>j</i> +1)-ésima variable dados los valores de las (<i>J</i> -1)
	variables restantes
T_H²	Estadístico de Hawkins
t^s	Estadístico de Student
t	Vector de coordenadas en el espacio de los CPs retenidos
$\tilde{\mathbf{t}}$	Vector de coordenadas en el espacio de los CPs excluidos
$\bar{\mathbf{T}}$	Matriz de coordenadas en el espacio completo de los CPs
T	Matriz de coordenadas en el espacio de los CPs retenidos

$\tilde{\mathbf{T}}$	Matriz de coordenadas en el espacio de los CPs excluidos
$\text{var}(c_j^{T^2})$	Varianza de las contribuciones al T^2 en la PR para la variable j
$\text{var}(c_j^{D^2})$	Varianza de las contribuciones al D^2 en la PR para la variable j
$\text{var}(c_j^{SPE})$	Varianza de las contribuciones al SPE en la PR para la variable j
$\text{var}(RBC_j^k)$	Varianza de las RBCs en la PR para la variable j
$\text{var}(SPE^{PR})$	Varianza del SPE en la PR
\dot{x}_k^*	Observación centrada de la variable k que minimiza el T^2 dados los valores de las $(J-1)$ variables restantes
\mathbf{x}	Vector observación estandarizado
$\dot{\mathbf{x}}$	Vector de observación centrado
\mathbf{x}_{NICN}	Vector del vecino en control estadístico más cercano a la observación
$\tilde{\mathbf{x}}_j$	Vector medición estandarizado con un único elemento distinto de cero en la posición j -ésima
$\hat{\mathbf{x}}$	Vector medición reconstruido
\mathbf{X}	Matriz bidimensional de datos estandarizados
$\underline{\mathbf{X}}$	Matriz tridimensional de datos estandarizados
$\hat{\mathbf{X}}$	Matriz bidimensional de las estimaciones de los datos, obtenidas empleando el modelo PCA

\mathbf{Y}	Matriz de datos de propiedades finales del producto
\mathbf{z}	Vector observación
$\bar{\mathbf{z}}$	Vector de medias muestrales de las observaciones contenidas en la PR
\mathbf{Z}	Matriz bidimensional de observaciones
$\underline{\mathbf{Z}}$	Matriz tridimensional de observaciones

Letras Griegas	Descripción
α	Nivel de significado del test de hipótesis
α_G	Nivel de significado global de la estrategia
α_L	Nivel de significado local de la estrategia
β	Matriz compuesta por los vectores ϕ asociados a la PR
χ^2	Distribución de probabilidad Chi-cuadrado
δ	Variable binaria
ϕ	Función de mapeo no lineal a un espacio de Hilbert
ϕ	Vector observación mapeado en el espacio de las características
$\bar{\phi}$	Vector observación mapeado en el espacio de las características y centrado
γ	Estadístico Combinado
γ_c	Valor crítico del Estadístico Combinado

κ	Parámetro para el cálculo de los límites de control de las CVs
λ	Autovalor de \mathbf{R}
$\lambda^{\beta^T \beta}$	Autovalor de $\beta^T \beta$
$\lambda^{\mathbf{K}}$	Autovalor de \mathbf{K}
μ	Vector de medias poblacionales de \mathbf{z}
θ	Multiplicador de Lagrange
$\% \sigma_T^{accum}$	Reconstrucción de la varianza total considerando los primeros Rt CPs
σ_T	Varianza total del sistema
σ_z	Vector de desvíos estándares muestrales de las observaciones contenidas en la PR
ζ	Autovectores de la matriz \mathbf{K} tales que $\ \zeta\ = \sqrt{\lambda^{\beta^T \beta}}$
ζ°	Autovectores de la matriz \mathbf{K} con norma unitaria
$\tau_j^{T^2}$	Límite de control para la contribución de la variable j al T^2
$\tau_j^{D^2}$	Límite de control para la contribución de la variable j al D^2
τ_j^{SPE}	Límite de control para la contribución de la variable j al SPE
τ_j^γ	Límite de control para la contribución de la variable j al γ
τ_j^{NICN}	Límite de control para la contribución de la variable j al T^2 según el método basado en el NICN

$\tau_j^{RBC^k}$	Límite de control para las RBCs de la variable j
\mathbf{v}	Autovectores de $\boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}$
ξ	Vector de dirección de la reconstrucción
$\bar{\Lambda}$	Matriz diagonal de autovalores de \mathbf{R}
Λ	Matriz de los primeros Rt autovalores de la matriz \mathbf{R}
$\tilde{\Lambda}$	Matriz de los últimos $J-Rt$ autovalores de la matriz \mathbf{R}
$\bar{\Lambda}^\varphi$	Matriz de autovalores de \mathbf{S}^φ
Λ^φ	Matriz de los primeros Rt autovalores de la matriz \mathbf{S}^φ
Λ^κ	Matriz de los primeros Rt autovalores de la matriz \mathbf{K}
Ω	Matriz de varianza-covarianza poblacional de \mathbf{x}
Ψ	Matriz que define el tipo de distancia entre \mathbf{x} y \mathbf{x}_{NICN}

Operaciones

\mathcal{P}	Problema de Optimización
\mathcal{E}	Valor esperado
ℓ	Transformación lineal

Acrónimos

AI	Número de Identificaciones Ambiguas
AST	Tiempo de Acción Luego de la Señal

AVTI	Número promedio de Errores Tipo I
CI	Componente Independiente
CP	Componente Principal
CIn	Condición Inicial
CV	Contribución de la variable al estadístico
E	Escalón
ICA	Análisis de Componentes Independientes
II	Número de Identificaciones Incorrectas
KDE	Estimación de la función de densidad de probabilidad basada en Kernel
KPCA	Análisis de Componentes Principales Kernel
KPCA-RBC	Análisis de Componentes Principales Kernel – CV basada en la reconstrucción
KPCA-CN	Análisis de Componentes Principales Kernel – Contribución normalizada
MA	Número de alarmas perdidas
MSPC	Control estadístico multivariable de procesos
NICN	Vecino en control más cercano
NICNBP	Método basado en el NICN para procesos batch
OSS	Estrategia en el espacio de las variables originales
OSSBP	Original Space Strategy para procesos batch
PCA	Análisis de Componentes Principales
PI	Número de Identificaciones Precisas
pdf	Función de densidad de probabilidad
PLS	Cuadrados Mínimos Parciales

PR	Población de Referencia
R	Rampa
RBC	Contribución Basada en la Reconstrucción
SCORES	Coordenadas de las observaciones en el espacio de las variables latentes
VI	Número de Identificaciones Vacías
VL	Variable latente
VO	Variable original